МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«САМАРСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ имени академика С.П. КОРОЛЕВА»
(Самарский университет)

А.А. БИРЮКОВ, А.П. МАРТЫНЕНКО

АТОМНАЯ ФИЗИКА

Учебное пособие

Рекомендовано редакционно-издательским советом федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования "Самарский национально-исследовательский университет имени академика С.П. Королева"в качестве учебного пособия для студентов, обучающихся по программам высшего образования по направлению 03.03.02 Физика.

Самара
Издательство Самарского университета
2016

УДК 539.1(075)
ББК 22.3я7
Б649

Рецензенты:
доктор физико-математических наук, профессор,
заведующий кафедрой физики атомного ядра и квантовой
теории столкновений
физического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова
В.И. Саврин,
доктор физико-математических наук, профессор,
Институт образовательной информатики ФГУ ФИЦ ИУ РАН
Р.Н. Фаустов

Бирюков А.А., Мартыненко А.П.
Б649 **Атомная физика**: учеб. пособие/*А.А. Бирюков, А.П. Мартыненко.*-
Самара: Изд-во Самарского университета, 2016. 220 с.

ISBN 978-5-7883-1126-5

Учебное пособие содержит теоретический материал по теме каждого семинарского занятия, разобранные задачи и около 200 задач для самостоятельного решения по основным разделам атомной физики. Справочный материал включен в виде приложений.

Предназначено для студентов университета, обучающихся по специальности 03.03.02 «Физика». Пособие написано при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (госзадание номер 1394).

УДК 539.1(075)
ББК 22.3я7

ISBN 978-5-7883-1126-5 © Самарский университет, 2016

СОДЕРЖАНИЕ

Предисловие 6

1. Квантовая природа электромагнитного излучения 11

1.1. Проблема равновесного теплового излучения. Формула М. Планка. Краткая теория 11

1.2. Примеры решения задач 17

1.3. Задачи для самостоятельного решения . . 27

1.4. Биографическое примечание . . 29

2. Корпускулярные свойства электромагнитного излучения 31

2.1. Корпускулярные свойства электромагнитного излучения. Фотоэффект. Эффект Комптона. Эффект Доплера. Краткая теория 31

2.2. Примеры решения задач 36

2.3. Задачи для самостоятельного решения . 38

2.4. Биографическое примечание . . 40

3. Модель атома Резерфорда-Бора. Квантовая теория Бора-Зоммерфельда 40

3.1. Модель атома Резерфорда-Бора. Квантовая теория Бора-Зоммерфельда. Краткая теория 40

3.2. Примеры решения задач 47

3.3. Задачи для самостоятельного решения 52

3.4. Биографическое примечание 55

4. Волны де Бройля. Соотношение неопределенностей Гейзенберга 56

4.1. Волны де Бройля. Соотношение неопределенностей Гейзенберга. Краткая теория 56

4.2. Примеры решения задач 64

4.3. Задачи для самостоятельного решения 67

4.4. Биографическое примечание . . 69

5. Матричная механика Гейзенберга. Операторы в квантовой механике. Соотношение неопределенностей Гейзенберга 71

5.1. Матричная механика Гейзенберга. Операторы в квантовой механике. Краткая теория 71
5.2. Примеры решения задач 83
5.3. Задачи для самостоятельного решения 85
5.4. Биографическое примечание 87

6. Уравнение Шредингера **88**
6.1. Одномерное уравнение Шредингера. Туннельный эффект. Краткая теория 88
6.2. Примеры решения задач 94
6.3. Задачи для самостоятельного решения 98
6.4. Биографическое примечание 100

7. Движение в центральном поле. Атом водорода **100**
7.1. Движение в центральном поле. Атом водорода. Краткая теория 100
7.2. Примеры решения задач 106
7.3. Задачи для самостоятельного решения 110
7.4. Биографическое примечание 112

8. Спин электрона. Многоэлектронные атомы. Спектры, рентгеновские спектры. Электронная оболочка атомов **113**
8.1. Состояние электронов в атоме. Краткая теория . . . 113
8.2. Примеры решения задач 120
8.3. Задачи для самостоятельного решения 125
8.4. Биографическое примечание 128

9. Атом в магнитном поле. Опыты Эйнштейна-де Гааза, Штерна-Герлаха. Эффект Зеемана **128**
9.1. Магнитные свойства атома. Краткая теория . 128
9.2. Примеры решения задач 131
9.3. Задачи для самостоятельного решения 136
9.4. Биографическое примечание 138

10. Атом в магнитном поле. Эффект Зеемана. Магнитный резонанс **139**
10.1. Квантование полного момента импульса электрона. Магнитный резонанс. Краткая теория 139

10.2. Примеры решения задач . . . 143
10.3. Задачи для самостоятельного решения . . . 146
10.4. Биографическое примечание . . . 148

11. Двухатомные молекулы **148**
11.1. Электронные состояния, вращение и колебание молекул. Краткая теория . . . 148
11.2. Примеры решения задач . . . 159
11.3. Задачи для самостоятельного решения . . . 163
11.4. Биографическое примечание . . . 164

12. Квантовая теория твердого тела, сверхпроводимость **166**
12.1. Свободные электроны в металлах и полупроводниках. Распределение Ферми-Дирака. Краткая теория . 166
12.2. Примеры решения задач . . . 178
12.3. Задачи для самостоятельного решения . 184
12.4. Биографическое примечание . . . 186

13. Ответы и указания к решениям **187**

14. Библиографический список **200**

15. Приложения **204**
15.1. Таблица 1. Характеристики элементов периодической системы . . . 204
15.2. Таблица 2. Основные физические постоянные . . . 207
15.3. Таблица 3. Рекомендованные значения энергетических эквивалентов . . . 209
15.4. Таблица 4. Некоторые единицы в СИ и СГС . . . 211
15.5. Таблица 5. Работа выхода электрона из металла . 211
15.6. Тонкая и сверхтонкая структура уровней энергии атома водорода с $n = 1, 2$ . . . 212
15.7. Таблица 6. Константы двухатомных молекул . . . 213
15.8. Таблица 7. Физические параметры некоторых твердых тел 214
15.9. Зоммерфельдовские интегралы . . . 215
15.10. Примерный перечень вопросов . . . 217

ПРЕДИСЛОВИЕ

Пятая часть университетского курса общей физики «Атомная физика» посвящена изучению квантовых представлений о строении материи и электромагнитного поля. Этот курс занимает особое место в изучении физических законов, поскольку призван сформировать у обучающихся квантовые представления о мире, исправить приобретенные «классические предрассудки». Знания по атомной физике важны для формирования у студентов современной физической картины мира и глубокого понимания природы физических процессов на атомном и молекулярном уровне. Данный предмет имеет особое значение в связи с быстрым развитием нанотехнологий.

Курс «Атомная физика» нацелен на получение базовых знаний по обширному кругу вопросов: проблема равновесного теплового излучени, структура атомов и молекул, корпускулярные свойства излучения, теория атомных спектров, основные положения и задачи квантовой механики, атомы в электромагнитном поле, проблемы физики элементарных частиц. В рамках данного курса студенты должны изучить методы квантовой механики, научиться их использовать для решения конкретных физических задач на соответствующем специальности уровне. Отметим, что хорошие знания по этому предмету необходимы студентам старших курсов для успешного изучения других разделов теоретической физики.

Основные задачи курса «Атомная физика»:

1. Раскрыть роль фундаментальных принципов и методов квантовой теории;

2. Научить использовать современный аппарат квантовой механики для решения конкретных задач;

3. Рассмотреть основные проблемы атомной физики;

4. Сформировать у студентов знания и навыки, позволяющие самостоятельно решать задачи по широкому кругу проблем атомной физики.

Существуют, по-видимому, две крайние точки зрения на преподавание физики в университетских курсах. Одна точка зрения принадлежит авторам, которые говорят, что классики науки уже написали необходимые учебники, осталось их только изучить. Ориентирован такой подход на хорошо подготовленную аудиторию (в советские времена конкурс на физический факультет университетов достигал 10-20 человек на место), на тех, кто может, например, за короткий срок освоить квантовую теорию поля по известной монографии Н.Н. Боголюбова и Д.В. Ширкова «Введение в

Рис. 1. Участники I Сольвеевского конгресса 30 октября – 3 ноября 1911 года «Излучение и кванты». Сидят (слева направо): Вальтер Нернст, Марсель Бриллюэн, Эрнест Сольве, Хендрик Лоренц, Эмиль Варбург, Жан Батист Перрен, Вильгельм Вин, Мария Кюри и Анри Пуанкаре. Стоят (слева направо): Роберт Голдсмит, Макс Планк, Генрих Рубенс, Арнольд Зоммерфельд, Фредерик Линдеманн, Морис де Бройль, Мартин Кнудсен, Фридрих Хасенёрль, Жорж Остелет, Эдуард Герцен, Джеймс Хопвуд Джинс, Эрнест Резерфорд, Хейке Камерлинг-Оннес, Альберт Эйнштейн и Поль Ланжевен.

теорию квантованных полей». Другая крайняя точка зрения заключается в том, что хороших учебников по физике, в доступной форме отражающих современные достижения в различных физических областях, имеется весьма ограниченное число. Поэтому задача каждого преподавателя внести свой посильный вклад в процесс создания методической литературы по современным достижениям физики. Предлагаемое учебное пособие направлено на то, чтобы помочь студентам освоить основные разделы «Атомной физики», научиться решать задачи. В данном пособии представлен как теоретический материал, который обсуждается на лекционных занятиях, так и практический материал в виде задач по основным разделам атомной физики. Важнейшая роль в достижении поставленных задач отводится семинарским занятиям. В данном пособии собраны около 200 задач по основным разделам курса атомной физики. Каждое семинарское занятие

содержит краткое изложение теории, несколько разобранных задач, с которыми необходимо ознакомиться перед началом самостоятелной работы. Отбор материала для данного учебного пособия основан на многолетнем опыте чтения курсов «Атомная физика» и «Квантовая механика» для студентов 3-4 курсов физического факультета Самарского университета. Современный опыт преподавания данных дисциплин убедительно показывает необходимость написания таких пособий, которые, как надеются авторы, будут полезны студентам и аспирантам, изучающим теоретическую физику. При подготовке настоящего пособия мы использовали задачи из хорошо известных задачников, список которых представлен в приложении, а также ряд материалов с доступных интернет сайтов.

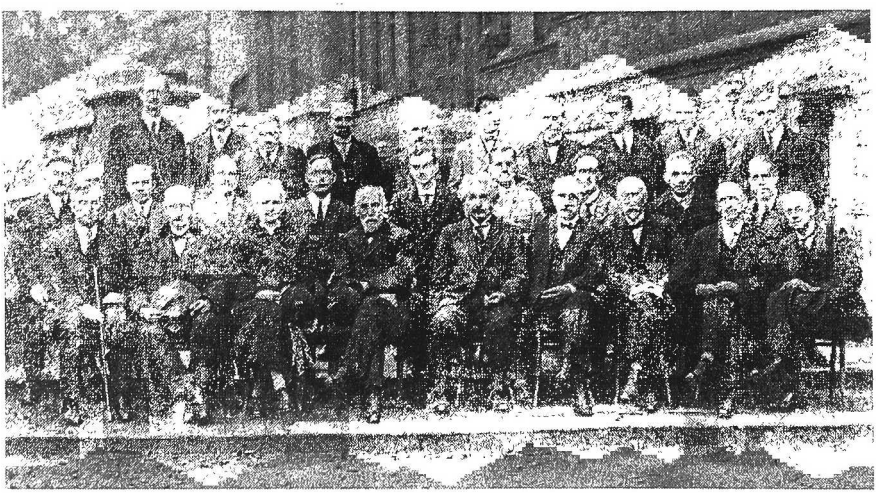

Рис. 2. Участники V Сольвеевского конгресса (1927) «Электроны и фотоны». 1-й ряд (слева направо): Ирвинг Ленгмюр, Макс Планк, Мария Кюри, Хенрик Лоренц, Альберт Эйнштейн, Поль Ланжевен, Шарль Гюи, Чарльз Вильсон, Оуэн Ричардсон. 2-й ряд (слева направо): Петер Дебай, Мартин Кнудсен, Уильям Брэгг, Хендрик Крамерс, Поль Дирак, Артур Комптон, Луи де Бройль, Макс Борн, Нильс Бор. Стоят (слева направо): Огюст Пикар, Эмиль Анрио, Поль Эренфест, Эдуард Герцен, Теофил де Дондер, Эрвин Шрёдингер, Жюль Эмиль Верншаффельт, Вольфганг Паули, Вернер Гейзенберг, Ральф Фаулер, Леон Бриллюэн.

На фотографии Рис.1 мы видим участников первого Сольвеевского конгресса 1911 года, сыгравшего огромную роль в обсуждении и развитии идей квантовой физики. Более ста лет назад, 30 октября - 3 ноября 1911 года, величайшие умы Европы встретились для того, чтобы обсудить кри-

зис, в котором оказалась физика. За предыдущие годы было открыто сразу несколько новых явлений (рентгеновское излучение, фотоэффект, радиоактивность, электроны), которые не могли быть объяснены законами классической физики. Ведущие физики пришли к выводу, что для разрешения ситуации необходим международный симпозиум. Восемнадцать светил были собраны в Брюсселе (Бельгия) богатым химиком Эрнестом Сольве. Самым молодым участником стал 32-летний Альберт Эйнштейн. Конгресс так и не достиг своих целей. В заключительном слове Сольве отметил: «Несмотря на прекрасные результаты, вы ещё не решили реальных проблем, которые остаются на переднем крае». На получение экспериментальных данных и научные дебаты о квантовой теории уйдёт ещё двадцать лет. Тем не менее было положено начало одному из важнейших международных научных форумов.

На фотографии Рис.2 мы видим участников V Сольвеевского конгресса 1927 года, сыгравшего огромную роль в становлении и развитии идей квантовой механики. На этом конгрессе состоялась знаменитая дискуссия между Альбертом Эйнштейном, пытавшимся спасти детерминизм, и Нильсом Бором, понявшим раньше многих, что возврат к детерминизму уже невозможен, ибо Макс Планк открыл универсальный квант действия, обнаруживший черты целостности в атомных процессах, совершенно чуждые идеям классической физики и превосходящие доктрину древних о предельной делимости материи. Таким образом в физику было впервые введено утверждение о наличии индетерминизма на субатомном уровне, совершился величайший переворот, определивший лицо физики 20-го века.

Согласно принципу соответствия физические теории не сменяют полностью одна другую в ходе развития физики; напротив, историческое развитие физики заключается в переходе ко все более общим теориям, а первоначально развитые теории сохраняют свою ценность в качестве предельных случаев этих общих теорий. Таково взаимоотношение между классической ньютоновской механикой (НМ) и релятивистской механикой (РМ), классической механикой и квантовой (КМ), квантовой и релятивистской квантовой теорией (РКТ), ньютоновской теорией тяготения (НТТ) и релятивистскими теориями гравитации (РТГ), в том числе общей теорией относительности (ОТО). Соотношение между классическими и неклассическими (релятивистскими, квантовыми) теориями устанавливается с помощью предельного перехода по той или иной фундаментальной постоянной. Под предельным переходом по какой-либо фундаментальной постоянной

понимается переход по безразмерному отношению некой размерной физической величины к соответствующей размерной физической постоянной (например, скорости тела v к скорости света c или действия S к постоянной Планка h). При этой операции основные законы и понятия более общей теории переходят в соответствующие законы и понятия первоначально развитой частной теории. Таким образом, фундаментальные постоянные определяют границы применимости этих более частных теорий. Выбирая в качестве осей ортогональных координат c^{-1}, $\hbar$, G, можно изобразить так называемый куб физических теорий, показанный на Рис. 3.

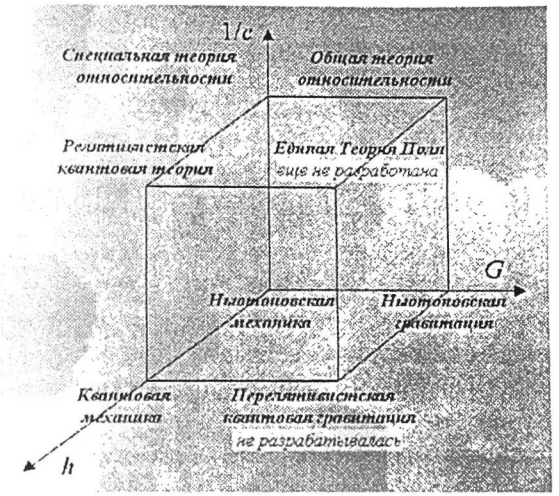

Рис. 3. Куб физических теорий советского космолога А.Л. Зельманова (1964 г.)

1. КВАНТОВАЯ ПРИРОДА ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

1.1. Проблема равновесного теплового излучения. Формула М. Планка. Краткая теория

Тепловое излучение - это электромагнитные волны, испускаемые нагретым телом (солнечный свет, пламя свечи, свет лампы накаливания, инфракрасное излучение человеческого тела и т.д.). Пусть есть некоторое тело, нагретое до температуры T, внутри которого вырезана полость. Так как стенки полости испускают тепловое излучение, полость будет заполнена этим излучением (см. рис.4). В стационарных условиях, когда температура тела поддерживается постоянной, характеристики теплового излучения в полости также будут иметь постоянные и строго определенные значения, а именно, такие значения, при которых процессы испускания и поглощения света стенками полости взаимно уравновешивают друг друга. Между стенками полости и излучением устанавливается тепловое равновесие. В этом случае тепловое излучение в полости называют равновесным. В полость можно поместить различные тела, нагретые до различной температуры. Опыт показывает, что с течением времени температура всех тел станет одинаковой. Каждое тело в единицу времени испускает и поглощает одинаковое количество энергии. Установившееся излучение в полости таково,что для произвольной площадки ds на внутренней поверхности оболочки за произвольный интервал времени dt в любом интервале частот $d\omega$ для каждого направления и поляризации количество поглощенной энергии равно количеству излученной.

Спектры излучения нагретых тел были измерены в опытах Люммером и Прингсгеймом в 1899 году. (см. рис.5) На рубеже 19-20 веков перед физикой встал вопрос: *как объяснить спектр теплового излучения, который наблюдали экспериментаторы.*

Для количественной характеристики поглощающей способности тела вводят величину

$$A = \frac{dW_{\text{погл}}}{dW_{\text{пад}}}, \tag{1}$$

которая равна отношению поглощенной телом энергии $dW_{\text{погл.}}$ к падающей на тело энергии $dW_{\text{пад.}}$. Она называется поглощательной способностью тела. Опыт показывает, что поглощательная способность тела является функцией абсолютной температуры и частоты излучения: $A =$

$A(\omega.T) \equiv A_\omega$. У разных тел эти функции совершенно различны. Другая важная характеристика тела - испускательная способность $E_\omega \equiv E(\omega, T)$. Она представляет собой поток лучистой энергии $d\Phi$ с частотой в интервале $\omega \div \omega + d\omega$, испускаемой за время dt площадкой dS поверхности тела внутрь телесного угла $d\Omega$:

$$d\Phi_{\text{изл.}} = E_\omega dS d\Omega d\omega dt \cos\phi, \tag{2}$$

где ϕ - угол между нормалью к площадке и направлением излучения. Кроме этих двух величин, относящихся к телу введем величины, характеризующие излучение. Обозначим $u(T)$ объемную плотность энергии излучения в полости. Ее можно разложить по частотам или длинам волн:

$$u(T) = \int_0^\infty u_\omega d\omega = \int_0^\infty u_\lambda d\lambda. \tag{3}$$

Величина $u_\omega(T)$ называется объемной спектральной плотностью энергии излучения. При этом выполняется равенство: $u_\omega d\omega = u_\lambda d\lambda$. Для равновесного теплового излучения $u_\omega \equiv u(\omega, T)$ не зависит от материала стенок полости. Эта особенность равновесного теплового излучения, установленная Кирхгофом, вытекает непосредственно из второго начала термодинамики Определение этой функции - основная задача теории теплового излучения.

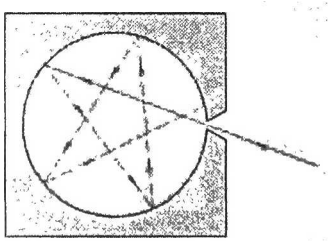

Рис. 4. Равновесное тепловое излучение в полости.

Другой физической величиной, которая используется для характеристики излучения является его интенсивность I или спектрльная интенсивность излучения I_ω (см. определение в (4)): $I = \int_0^\infty I_\omega d\omega$. Установим связь между характеристиками теплового излучения и полости E_ω, A_ω, I_ω. Для этого рассмотрим площадку dS стенки полости, на которую в пределах телесного угла $d\Omega$ падает поток излучения частоты ω:

$$d\Phi_{\text{пад}} = I_\omega dS \cos\phi d\omega d\Omega dt. \tag{4}$$

Часть потока отражается:

$$d\Phi_{\text{отр}} = (1 - A_\omega) I_\omega dS \cos\phi d\omega d\Omega dt. \tag{5}$$

На отраженный поток накладывается собственное излучение площадки:

$$d\Phi_{\text{изл}} = E_\omega dS \cos\phi d\omega d\Omega dt. \tag{6}$$

В состоянии равновесия отраженный и излученный потоки в направлении ϕ должны совпадать с падающим потоком. Тогда получим:

$$I_\omega = \frac{E_\omega}{A_\omega}. \tag{7}$$

Этот закон установил в 1859 году немецкий физик Кирхгоф: *Отношение испускательной способности тела к его поглощательной способности одинаково для всех тел в равновесии с излучением и является универсальной функцией T, ω.* Излучательная способность абсолютно черного тела равна спектральной интенсивности излучения I_ω:

$$E_\omega = I_\omega. \tag{8}$$

При этом объемная плотность энергии связана с интенсивностью излучения слудующим образом: $u = 4\pi I/c$. Аналогичная связь имеется между спектральными характеристиками.

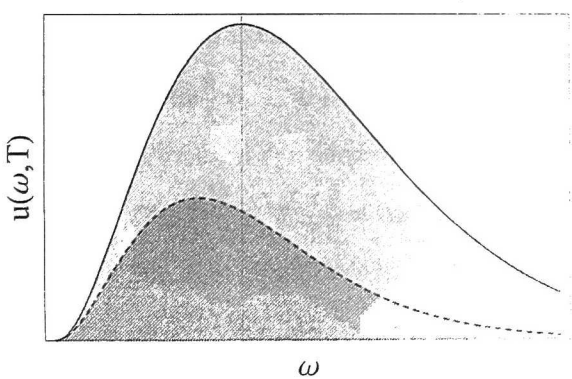

Рис. 5. Спектры излучения тел при различных температурах как функции частоты.

Важные результаты для нахождения u_ω можно получить, рассматривая термодинамические соотношения для равновесного теплового излучения.

Давление излучения в полости P и объемная плотность энергии u связаны между собой соотношением:

$$P = \frac{1}{3}u. \tag{9}$$

Чтобы получить этот результат заметим, что плотность импульса g электромагнитного излучения и объемная плотность энергии u, как это следует из уравнений Максвелла, связаны формулой:

$$g = \frac{u}{c}. \tag{10}$$

Запишем поток излучения, который падает из элемента телесного угла $d\Omega$ на площадку $dS = 1$:

$$I \cos\phi d\Omega dt = \frac{c}{4\pi} u \cos\phi d\Omega dt. \tag{11}$$

Тогда импульс, переданный площадке, равен:

$$\frac{1}{c}\frac{c}{4\pi} u \cos\phi d\Omega dt \cdot 2 = \frac{u}{2\pi}\cos^2\phi d\Omega dt. \tag{12}$$

Интегрируя это выражение по телесному углу $d\Omega$, получим полный переданный импульс:

$$\int_0^{\pi/2} \sin\phi \cos^2\phi d\phi \frac{u}{2\pi} dt \int_0^{2\pi} = \frac{1}{3} u dt. \tag{13}$$

Тогда давление излучения $P = F/S = \frac{dp}{dt} = u/3$ при $S = 1$. Запишем второй закон термодинамики, используя соотношение (9):

$$TdS = d(u \cdot V) + PdV = \frac{4}{3} u dV + V\frac{du}{dT} dT. \tag{14}$$

Перепишем последнее выражение для полного дифференциала энтропии:

$$dS = \frac{4}{3}\frac{u}{T} dV + \frac{V}{T}\frac{du}{dT} dT. \tag{15}$$

Отсюда находим частные производные энтропии по объему и абсолютной температуре:

$$\frac{\partial S}{\partial V} = \frac{4}{3}\frac{u}{T}, \quad \frac{\partial S}{\partial T} = \frac{V}{T}\frac{du}{dT}. \tag{16}$$

Приравнивая смешанные частные производные второго порядка по V, T $\partial^2 S/\partial T \partial V \quad \partial^2 S/\partial V \partial T$, получим дифференциальное уравнение:

$$\frac{du}{dT} = 4\frac{u}{T}, \tag{17}$$

из которого следует закон Стефана-Больцмана:

$$u = \sigma T^4, \tag{18}$$

где σ постоянная Стефана-Больцмана. Следует заметить, что иногда (см. задачи, разобранные ниже) закон Стефана-Больцмана формулируют для энергетической светимости тела M. В этом случае происходит изменение постоянной Стефана-Больцмана, определяемое фактором $c/4$, где c-скорость света (см. задачу 4). В результате мы получаем термическое уравнение состояния для излучения в полости: $P = \frac{1}{3}\sigma T^4$ и калорическое уравнение состояния: $u = \sigma T^4 V$. С помощью этих уравнений находим из (16) энтропию равновесного теплового излучения:

$$S = \frac{4}{3}\sigma T^3 V. \tag{19}$$

При адиабатическом процессе $dQ = 0$, $S = const$, поэтому $VT^{4/3} = const$. В 1893 году В. Вин установил закон (критерий Вина), определяющий важные свойства функции $u_\omega(\omega, T)$.

Пусть сферическая оболочка с зеркальными стенками с равновесным тепловым излучением адиабатически расширяется. На рис.6 показан луч света, который испытывает два последовательных отражения от стенок оболочки.

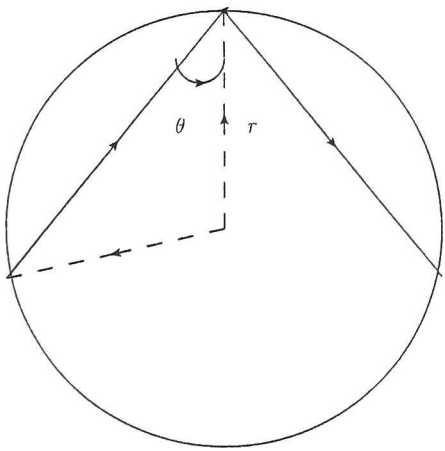

Рис. 6. Отражение луча света от расширяющейся сферической оболочки.

Время между двумя последовательными отражениями $\Delta t = 2r\cos\theta/c$. За это время радиус оболочки получит приращение $\Delta r = \dot{r}dt$. При отражении происходит доплеровское изменение частоты: $\Delta\nu/\nu = v\cos\theta/c$, где v-скорость движения источника. Тогда:

$$\frac{\Delta\omega}{\omega} = 2\frac{\dot{r}}{c}\cos\theta = 2\frac{\Delta r}{\frac{2r\cos\theta}{c}c}\cos\theta = \frac{\Delta r}{r} \tag{20}$$

Интегрируяэто уравнение, получим:

$$\omega^3 V = const. \tag{21}$$

Используя полученный ранее адиабатический инвариант, находим: $\omega/T = const$. Если $uV^{4/3} = const$ и $\omega^4 V^{4/3} = const$, то и $u/\omega^4 = const$. При отражении от движущейся стенки полости будет выполняться равенство:

$$\frac{u_\omega d\omega}{\omega^4} = \frac{u'_{\omega'}d\omega'}{\omega'^4}. \tag{22}$$

Из последней формулы получим:

$$u_\omega(\omega, T) = \frac{\omega^4}{\omega'^4}\frac{d\omega'}{d\omega}u'_{\omega'}(\omega', T') = \frac{T^3}{T'^3}u'_{\omega'}\left(\frac{T'}{T}\omega, T\right) \tag{23}$$

Чтобы величина справа не зависела от темпетатуры T, должно выполняться равенство:

$$u_\omega(\omega, T) = T^3\phi\left(\frac{\omega}{T}\right), \tag{24}$$

из которого также следует другое равенство:

$$u_\omega(\omega, T) = \omega^3 f\left(\frac{\omega}{T}\right). \tag{25}$$

Эта формула называется критерием Вина. Определить конкретный вид функции $f(\omega/T)$ только термодинамическими методами невозможно. В разобранных ниже задачах представлен вывод формул Рэлея-Джинса и Планка.

Наряду с критерием Вина важное значение имеет вычисление числа стоячих волн (осцилляторов поля), которые образуются в равновесном состоянии. Оно дает возможность (см. задачу 2) перейти к нахождению объемной спектральной плотности энергии. Рассмотрим равновесное излучение в полости с зеркальными стенками, которое можно рассматривать как совокупность стоячих волн. Число стоячих волн в полости объема $V = L^3$

(куб) можно найти, решая волновое уравнение с нулевыми граничными условиями для электромагнитного поля на стенках полости. Общее число волн, приходящееся на частоты из интервала $\omega \div \omega + d\omega$, равно (см. книги [1], [2, [3]]):

$$dZ = \frac{\omega^2 L^3}{\pi^2 c^3} d\omega = \frac{8\pi L^3}{c^3} \nu^2 d\nu. \tag{26}$$

1.2. Примеры решения задач

Задача 1. *Медный шарик радиуса* $r = 10.0$ *мм с абсолютно черной поверхностью поместили в откачанный сосуд, температура стенок которого поддерживается близкой к абсолютному нулю. Начальная температура шарика* $T = 300$ *K. Через какое время его температура уменьшится в n=1.50 раза? Удельная теплоемкость меди* $c = 0.38 \frac{Дж}{г \cdot K}$.

Решение:

Потери энергии шарика на излучение в единицу времени определим через энергитическую светимость абсолютно черного тела:

$$P = M \cdot S, \tag{27}$$

где M-энергитическая светимость (энергия, испускаемая единицей площади поверхности тела в единицу времени по всем направлениям), S-площадь поверхности шарика. Из определения теплоемкости имеем: $dQ/dT = cm$. Учитывая, что энергия, испускаемая шариком за время dt равна $dQ = -Pdt$ (знак минус соответствует потери энергии шариком на излучение), получаем:

$$-M \cdot S \cdot dt = c \cdot m \cdot dT. \tag{28}$$

Так как стенки сосуда имеют температуру близкую к абсолютному нулю шарик не получает энергию из окружающей среды. Рассмотрим закон Стефана-Больцмана для энергетической светимости:

$$M = \sigma T^4 \tag{29}$$

Подставляя (29) в (28), получим дифференциальное уравнение:

$$\frac{dT}{T^4} = -\frac{S\sigma}{cm} dt, \tag{30}$$

интегрируя которое находим время, за которое температура уменьшится в n раз:

$$\frac{1}{T} - \frac{n^3}{T^3} = -\frac{\sigma S}{3cm}t, \quad t = \frac{c\rho r(n^3-1)}{9\sigma T^3}, \tag{31}$$

где ρ — плотность меди. Подстановка численных значений дает ответ задачи t 1.6 ч.

Задача 2. *Тепловое излучение в полости можно представить как совокупность осцилляторов (собственных колебаний) с различными частотами. Полагая, что распределение осцилляторов по энергиям E подчиняется закону Больцмана, найти при температуре T среднюю энергию осциллятора с частотой ω, если энергия каждого осциллятора может иметь:*
a) любые значения (непрерывный спектр);
b) только дискретные значения $n\hbar\omega$, где n-целое число.

Решение:

Среднее значение энергии осциллятора электромагнитного поля можно найти, считая, что эта энергия может принимать любые значения от 0 до ∞ с вероятностью $Ae^{-\frac{E}{kT}}$ (распределение Больцмана):

$$< E >= \frac{\int\limits_0^\infty Ee^{-\frac{E}{kT}}dE}{\int\limits_0^\infty e^{-\frac{E}{kT}}dE} = \tag{32}$$

$$-\frac{d}{d\beta}\ln\int_0^\infty e^{-\beta E}dE = kT, \quad \beta = \frac{1}{kT}.$$

Эта формула приводит к закону Рэлея-Джинса для объемной спектральной плотности излучения:

$$u(\nu,T)d\nu = dZ\cdot kT, \quad u(\nu,T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}kT, \tag{33}$$

которая неправильно описывает спектр излучения абсолютно черного тела в области больших частот. *По существу, замечает Л.Д. Ландау, это*

была полнейшая научная катастрофа, крах тех положений, которые составляли основу классической физики, хотя в то время ученые не вполне ясно представляли себе это. Первым, кто понял всю катастрофичность такого положения вещей и осознал необходимость каких-то решительных, новых выводов, был М. Планк.

В такой ситуации немецкий физик М. Планк выдвинул гипотезу о том, что *излучение и поглощение света веществом происходит не непрерывно, а конечными порциями, называемыми квантами света или квантами энергии.* (При нагревании стенок абсолютно черного тела внутрь полости излучается весь спектр частот: инфракрасные, видимые и ультрафиолетовые. Последовательный теоретический вывод формулы для равновесного теплового излучения должен был основываться на физической модели. В 1882 году М. Планк писал: «Несмотря на все успехи, достигнутые атомной теорией, ясно, что в конце концов она уступит место предположению о непрерывности материи». Восемнадцать лет спустя он все еще не верил в атомы: неопровержимого доказательства их существования не было. Из теории электромагнетизма М. Планк знал, что электрический заряд, колеблющийся с определенной частотой, испускает и поглощает излучение только той же частоты. Поэтому он представил себе стенки абсолютно черного тела в виде набора огромного числа осцилляторов. Хотя каждый осциллятор излучает только одну частоту, вместе они могут излучать весь спектр частот, которые присутствуют внутри абсолютно черного тела). Энергия осциллятора может принимать дискретные значения

$$E_0, \quad 2E_0, \quad 3E_0, \quad \ldots, \quad nE_0, \ldots \tag{34}$$

В этом случае средняя энергия осциллятора определяется формулой:

$$< E >= \frac{\sum_{n=0}^{\infty} nE_0 e^{-\beta n E_0}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta n E_0}} = \tag{35}$$

$$= -\frac{d}{d\beta} \ln \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta n E_0} = -\frac{d}{d\beta} \ln \frac{1}{1 - e^{-\beta E_0}} = \frac{E_0}{e^{\beta E_0} - 1}.$$

Таким образом, средняя энергия осциллятора определяется минимальной порцией энергии E_0. Чтобы объемная спектральная плотность энергии

$$u(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{E_0}{e^{\frac{E_0}{kT}} - 1} \tag{36}$$

удовлетворяла критерию Вина, необходимо положить $E_0 = h\nu = \hbar\omega$, где h-постоянная Планка. Тогда закон излучения Планка принимает вид:

$$u(\nu, T) = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}. \tag{37}$$

Разделив $u(\nu, T)$ на энергию одного кванта, получим общее число квантов (фотонов) данной частоты в единице объема:

$$n(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} \tag{38}$$

Тогда, разделив $n(\nu, T)$ на число квантовых состояний dZ получим, что в одном квантовом состоянии находится число фотонов с частотой ν равное

$$\bar{n}(\nu, T) = \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}. \tag{39}$$

Эта формула называется распределением Бозе-Эйнштейна.

В современной квантовой физике постоянная Планка выступает в различных ролях. Наличие постоянной Планка в какой-либо формуле означает, что эти формулы описывают квантовые явления и постоянная Планка служит мерой их квантования. С постоянной Планка связана наименьшая величина кванта действия, и она позволяет решить - подчиняется ли данное физическое явление классическим или квантовым законам. Если в какой-то физической системе численное значение динамической переменной с размерностью действие сравнимо с постоянной Планка, то поведение этой системы должно описываться в рамках квантовой теории. Если же значения переменных с размерностью действие намного превосходит значение постоянной Планка, то система с достаточной точностью описывается законами классической физики.

Задача 3. *В результате расширения Вселенной (Метагалактики) после Гигантского Взрыва возникшее электромагнитное излучение начало остывать. В настоящее время это излучение (его называют реликтовым) имеет вид теплового излучения с максимумом испускательной способности при длине волны λ_m=1.07 мм (см. Рис. 5). Какова температура этого излучения?*

Решение:

Условие задачи требует некоторых пояснений. Вселенная обычно определяется как совокупность всего, что существует физически. Звезды во Вселенной обладают тенденцией образовывать иерархию систем различных масштабов. Важнейшее звено этой иерархии - огромные системы сотен миллиардов звезд, называемые галактиками. Общее число галактик в Метагалактике должно достигать многих миллиардов. Млечный Путь - Галактика, в которой находятся Земля, Солнечная система и все отдельные звёзды, видимые невооружённым глазом. Современные представления об истории возникновения нашей Метагалактики основываются на следующих экспериментальных наблюдениях:

1. Исследования спектральных линий звезд показывают, что Метагалактика в среднем обладает единым химическим составом. Преобладают водород и гелий. Остальное составляют главным образом кислород и железо.

2. В спектрах элементов далеких галактик обнаруживается систематическое смещение в сторону красной части. Величина этого смещения возрастает по мере удаления галактик от наблюдателя.

3. Измерения радиоволн, приходящих из космоса в сантиметровом и миллиметровом диапазоне , указывает на то, что космическое пространство равномерно и изотропно заполнено слабым радиоизлучением. Температура излучения 2.7 градусов Кельвина, плотность 450 протонов в кубическом сантиметре.

4. Крупномасштабное распределение галактик соответствует постоянной плотности массы, составляющей 0 3 бариона на каждый кубический метр.

5. Анализ радиактивных распадов в метеоритах показывает, что некоторые из их компонентов должны были возникнуть 14 и более миллиардов лет назад.

В 1915 г. А. Эйнштейн сформулировал основные положения и уравнения общей теории относительности (ОТО). Первыми предсказанными и проверенными экспериментальными следствиями ОТО стали:

1. Сдвиг перигелия орбиты Меркурия по сравнению с предсказаниями по теории Ньютона.

2. Отклонение светового луча в гравитационном поле Солнца.

3. Гравитационное красное смещение (изменения частоты испущенного некоторым источником света по мере удаления от массивных объектов).

В 1917 г. им было получено статическое решение уравнений ОТО, в соответствии с которым радиус Вселенной есть величина постоянная. Мо-

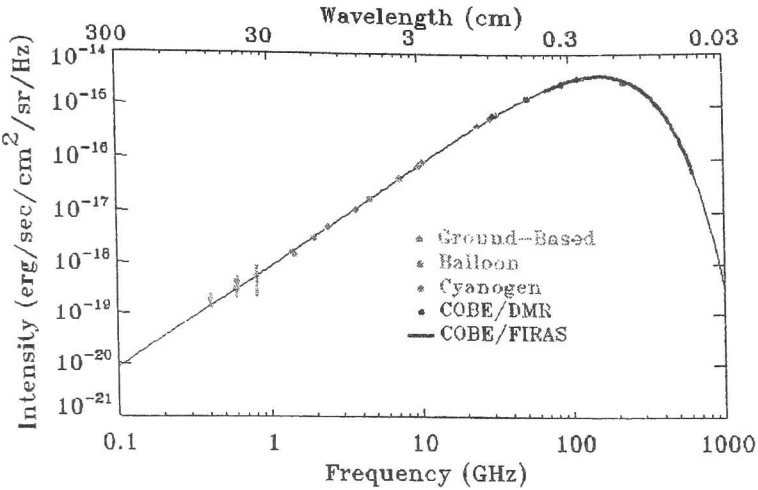

Рис. 7. Энергетический спектр реликтового излучения. Максимум спектральной интенсивности приходится на длину волны $\lambda_m = 1.07$ мм.

дель Вселенной А. Эйнштейна была статичной (не двигалась), стационарной (неизменной) и конечной в пространстве. В 1922 г. советский физик А.А. Фридман нашел нестационарное решение уравнений общей теории относительности А. Эйнштейна. Независимо это решение было получено также французским физиком и астрономом Ж. Леметром в 1927 г. Первоначально А. Эйнштейн считал, что это решение неприемлемо. Однако позже последовала переписка Эйнштейна и Фридмана и А. Эйнштейн признал корректность их математических рассуждений. В этом решении было предсказано расширение Вселенной, то есть увеличение радиуса Вселенной с течением времени. В 1929 году расширение Вселенной было обнаружено экспериментально американским физиком Э. Хабблом. Закон расширения Вселенной имеет вид (величина постоянной в этом законе, полученная Эдвином Хабблом $H = 558$ км/(с $\cdot$ Мпс):

$$v = H \cdot r, \tag{40}$$

где v- скорость удаления от нас астрономического объекта, находящегося

на расстоянии r. Расширение Вселенной означает, что галактики удаляются друг от друга. Это не относится к галактикам, находящимся в одном скоплении и гравитационно связанными друг с другом. Пространство, оставаясь однородным и изотропным, растягивается, в результате чего все расстояния увеличиваются. Коэффициент пропорциональности в (40) носит название постоянной Хаббла, современное значение которой

$$H = \left(73^{+4}_{-3}\right) \frac{\text{км}}{\text{с} \cdot \text{Мпс}}. \tag{41}$$

В космологии традиционной единицей измерения длины является мегапарсек: 1 Мпс $= 10^6$ Пс $= 3.1 \cdot 10^{24}$ см. Парсек - расстояние, с которого объект в 1 а.е. виден под углом одна секунда (1 а.е. - среднее расстояние от Земли до Солнца). Скорость расширения Вселенной регулируется балансом между полем тяготения и направленным наружу импульсом содержимого Вселенной.

Заметим, что в открытии закона расширения Вселенной приняли участие многие ученые, среди которых выделяют французского астронома Ж. Леметра. Он предсказал расширение Вселенной на два года раньше, чем это было сделано Э. Хабблом. В 1938 году американский физик Джордж (Георгий Антонович) Гамов, предсказал существование фонового, т.е. исходящего не от звезд, туманностей и т.д., а из пустого пространства) электромагнитного излучения во Вселенной. В 1946 году он выдвинул объясняющую происхождение этого излучения модель эволюции Вселенной, называемую «горячей Вселенной». Согласно теории горячей Вселенной реликтово излучение является остаточным излучением, сформировавшимся на самых ранних высокотемпературных стадиях эволюции Вселенной во времена близкие к началу расширения современной Вселенной 13.7 млрд. лет назад. Если бы в течение первых нескольких минут существования Вселенной не было интенсивного фона излучения, то ядерные реакции должны были происходить столь быстро, что большая доля имевшегося водорода сварилась бы в более тяжелые элементы. А это противоречит тому факту, что около трех четвертей сегодняшней Вселенной составляет водород. Этот процесс быстрого приготовления ядер мог быть предотвращен, только если Вселенная была заполнена излучением, имевшем чудовищную температуру на очень коротких длинах волн. Таким образом, в начале расширения наша Вселенная находилась в состоянии почти идеального термодинамического равновесия и имела чрезвычайно высокую температуру. С тех пор она продолжает расширяться и остывает. Когда температура во Вселенной упала

до 3000 К, в реликтовом излучении перестало хватать достаточно энергичных фотонов для поддержания атомов водорода и гелия в ионизованном состоянии. Таким образом, первичная плазма, состоящая из ядер, электронов и фотонов превратилась в нейтральные атомы и фоновое реликтовое излучение. Тогда фотоны реликтового излучения стали свободно распространяться в пространстве, уменьшая свою энергию из-за продолжающегося расширения Вселенной. Барионное вещество под действием гравитационного притяжения стало собираться в звезды и формировать галактики и более протяженные структуры.

В 1964 году лаборатория фирмы «Белл Телефон» стала обладательницей необычной радиоантенны, находившейся в Кроуфорд Хилле, Холмдел, Нью-Джерси. Антенна была построена для связи через спутник «Эхо», и 20-футовый рупорный отражатель со сверхнизким уровнем шума делал антенну многообещающим инструментом для радиоастрономии. Два радиоастронома, А.А. Пензиас и Р.В. Вилсон, решили использовать антенну для измерения интенсивности радиоволн, излучаемых нашей галактикой. Измерения проводились первоначально на длине волны 7.35 см, а затем и в миллиметровом диапазоне. С помощью формулы Вина А.А. Пензиас и Р.В. Вилсон определили температуру фонового излучения:

$$T = \frac{b}{\lambda_{max}} = \frac{0.290 \text{ см} \cdot \text{К}}{1.07 \cdot 10^{-1} \text{ см}} = 2.71 \ K. \tag{42}$$

Интересно заметить, что своей публикации А.А. Пензиас и Р.В. Вилсон дали скромное название "Измерение избыточной антенной температуры на частоте 4080 МГц". В 1978 году А.А. Пензиас и Р.В. Вилсон были удостоены Нобелевской премии. Следует упомянуть, что физик-экспериментатор из Принстона Роберт Дикке вместе с двумя другими физиками П.Г. Роллом и Д.Т. Уилкинсоном в 1964 г. начали строить антенну для поиска микроволнового фона излучения, но не успели завершить свои измерения.

Задача 4. *Исследование спектра излучения Солнца показывает, что максимум спектра соответствует длине волны* $\lambda_{max} = 500$ *нм. Принимая Солнце за абсолютно черное тело, определить энергетическую светимость Солнца, мощность излучения Солнца. Оценить время, за которое его масса уменьшится на один процент, за счет теплового излучения. Масса Солнца* $M_\odot = 2.0 \cdot 10^{30}$ *кг, его радиус* $R_\odot = 7.0 \cdot 10^8$ *м.*

Решение:

Излучение площади dS в направлении угла ϕ определяется следующей формулой:

$$E_\omega d\omega \cos\phi dS d\Omega dt, \tag{43}$$

где E_ω - испускательная способность тела. Энергетической светимостью M тела называют энергию, испускаемую с единицы площади поверхности по всем направлениям в единицу времени:

$$M = \int_0^\infty E_\omega d\omega \int_0^{\pi/2} \cos\phi \sin\phi d\phi 2\pi = \int_0^\infty I_\omega d\omega \pi = \frac{c}{4} u, \tag{44}$$

где u объемная плотность излучения. Записывая закон Стефана-Больцмана для энергетической светимости, получим:

$$M = \sigma T^4 = \sigma \left(\frac{b}{\lambda_{max}}\right)^4 = 5.67 \cdot 10^{-5} \frac{\text{эрг}}{\text{с} \cdot \text{см}^2 \cdot K^4} \left(\frac{0.290 \cdot \text{см} \cdot \text{K}}{500 \cdot 10^{-7} \text{см}}\right)^4 = \tag{45}$$

$$= 6.416 \cdot 10^{10} \frac{\text{эрг}}{\text{см}^2 \cdot c}.$$

Чтобы найти мощность излучения Солнца, то есть энергию, которую излучает в единицу времени Солнце, необходимо умножить полученную энергетическую светимость на площадь поверхности Солнца:

$$W = M \cdot 4\pi R_\odot^2 = 6.416 \cdot 10^{26} \frac{\text{эрг}}{\text{см}^2 \cdot c} \cdot 4\pi 49.0 \cdot 10^{20} \text{см}^2 = 3.95 \cdot 10^{33} \frac{\text{эрг}}{\text{с}}. \tag{46}$$

Пусть изменение массы Солнца за время Δt равно ΔM. Тогда

$$\Delta M = \frac{W \cdot \Delta t}{c^2} = 0.01 \quad M_\odot; \tag{47}$$

$$\Delta t = \frac{0.01}{W} \frac{M_\odot c^2}{} = \frac{0.01 \cdot 2.0 \cdot 10^{33} \text{г} \cdot 9 \cdot 10^{20} \frac{\text{см}^2}{c^2}}{3.95 \cdot 10^{49} \frac{\text{эрг}}{\text{с}}} = 4.566 \cdot 10^{18} c \approx 1.44 \cdot 10^{11} \text{лет}. \tag{48}$$

Задача 5. *Фотон с частотой ω_0 испущен с поверхности Звезды, масса которой M и радиус R. Найти гравитационное смещение частоты фотона $\Delta\omega/\omega_0$ на очень большом расстоянии от Звезды. Каким будет это смещение для Солнца.*

Решение:

Масса покоя фотона равна нулю. Вместе с тем фотон имеет энергию $E_\gamma = \hbar\omega$. Ему можно приписать гравитационную массу по формуле Эйнштейна: $m = \hbar\omega/c^2$ Имея гравитационную массу фотон может взаимодействовать с другими материальными телами. По условию задачи фотон взаимодействует со звездой. Рассмотрим, как меняется энергия фотона, когда он пролетает расстояние dr:

$$dE = -Fdr = -G\frac{mM}{r^2}dr, \quad F = G\frac{mM}{r^2}. \tag{49}$$

Знак минус означает, что сила притяжения, действующая со стороны звезды на фотон направлена противоположно его перемещению $d\mathbf{r}$. Подставляя сюда энергию и массу фотона, получим дифференциальное уравнение:

$$d(\hbar\omega) = -G\frac{\hbar\omega M}{c^2 r^2}dr, \quad \frac{d\omega}{\omega} = -\frac{GM}{c^2}\frac{dr}{r^2}. \tag{50}$$

Проинтегрируем это соотношение по ω в пределах от начальной частоты ω_0 до текущей частоты ω и по расстоянию от радиуса звезды R до текущего расстояния r:

$$\ln\frac{\omega}{\omega_0} = \frac{GM}{c^2}\left(\frac{1}{r} - \frac{1}{R}\right). \tag{51}$$

Таким образом, зависимость частоты фотона от расстояния до звезды определяется выражением:

$$\omega = \omega_0 \exp\left[\frac{GM}{c^2}\left(\frac{1}{r} - \frac{1}{R}\right)\right] \tag{52}$$

При $r \to \infty$ получим следующее значение частоты:

$$\omega = \omega_0 e^{-\frac{GM}{Rc^2}}. \tag{53}$$

Тогда относительное изменение частоты света равно (для Солнца)

$$\frac{\Delta\omega}{\omega_0} = \frac{\omega_0 - \omega}{\omega_0} = 1 - e^{-\frac{GM}{c^2 R}} = 2.1 \cdot 10^{-6} \tag{54}$$

Для получения численных оценок $\frac{\Delta\omega}{\omega_0}$ удобно разложить экспоненту в ряд, пользуясь малостью ее аргумента, и удержать при этом первый неисчезающий член разложения.

1.3. Задачи для самостоятельного решения

1. При переходе от одной температуты к другой площадь под кривой функции $u_\lambda = f(\lambda, T)$ уменьшилась в n=13 раз. Как и во сколько раз изменилась при этом длина волны, соответствующая максимуму функции $f(\lambda, T)$?

2. Зная, что давление теплового излучения p = u/3, где u-плотность энергии излучения, найти:

   a) давление теплового излучения во внутренних областях Солнца, где температура T=$1.6 \cdot 10^7$ K;

   b) температуру T полностью ионизированной водородной плазмы плотностью $\rho = 0.10$ г/см^3, при которой давление теплового излучения равно кинетическому давлению частиц плазмы (при высоких температурах вещество подчиняется уравнению состояния для идеальных газов).

3. Какое число фотонов желтого цвета длиной волны $\lambda = 0.6$ мкм имеет общую энергию 1.0 Дж?

4. Вин предложил следующую формулу для распределения энергии в спектре теплового излучения $u_\omega = A\omega^3 e^{-a\omega/T}$, где $a = 7.64 \cdot 10^{-12} K \cdot c$. Найти с помощью этой формулы при T=2000 K:

   a) наиболее вероятную частоту излучения;

   b) среднюю частоту излучения.

5. Определить число собственных поперечных колебаний струны длиной l в интервале частот $(\omega, \omega + d\omega)$, если скорость распространения колебаний равна v. Считать, что колебания происходят в одной плоскости.

6. Вычислить с помощью формулы Планка числовое значение постоянной b в законе смещения Вина.

7. Воспользовавшись формулой Планка, найти:

   а) число фотонов в 1 см^3 в спектральных интервалах $(\omega, \omega + d\omega)$ и $(\lambda, \lambda + d\lambda)$;

   б) полное число фотонов в 1 см^3 при $T = 300$ K.

8. Вычислить с помощью формулы Планка при $T = 1000$ К:

   а) наиболее вероятную энергию фотонов;

   б) среднюю энергию фотонов.

9. Показать с помощью формулы Вина, что в спектре распределения энергии теплового излучения по длинам волн:

   а) наиболее вероятная длина волны $\lambda_m \sim 1/T$;

   b) максимальная спектральная плотность энергии пропорциональна T^5

10. Найти наиболее вероятную длину волны в спектре теплового излучения с энергетической светимостью $M = 5,7 \text{Вт/см}^3$

11. Имеются две полости 1 и 2 с малыми отверстиями одинакового радиуса $r = 5,0$ мм и абсолютно отражающими наружными поверхностями. Полости отверстиями обращены друг к другу, причем расстояние между этими отверстиями $l = 100$ мм. В полости 1 поддерживают температуру $T_1 = 1250\ K$. Найти установившуюся температуру в полости 2, имея в виду, что абсолютно черное тело является ламбертовским излучателем ($L = M/\pi$, где L-яркость отверстия полости).

12. Найти число собственных поперечных колебаний прямоугольной мембраны площадью S в интервале частот $(\omega, \omega + d\omega)$, если скорость распространения колебаний v.

13. Вычислить с помощью формулы Планка мощность излучения единицы поверхности абсолютно черного тела в интервале длин волн, отличающихся не более чем на $n = 0.50\%$ от наиболее вероятной длины волны при T = 2000 K.

14. Определить с помощью формулы Планка числовое значение постоянной Стефана- Больцмана.

15. Определить с помощью формулы Планка температуру теплового излучения, средняя длина волны которого $< \lambda >= 2.67$ мкм.

16. В 1960 г. Паунд и Ребки в Гарвардском университете (США) с использованием метода регистрации γ-квантов, основанного на эффекте Мессбауэра, провели успешный эксперимент по обнаружению гравитационного смещения частоты фотонов. Эксперимент Паунда и Ребки

является первым проведённым в земных условиях экспериментом по изучению влияния гравитации на электромагнитные явления. В эксперименте приемник γ-излучения был расположен на высоте $H = 22.5$ м над источником. Какое изменение частоты фотона удалось зарегистрировать ученым, если использовались гамма-кванты с энергией $E_\gamma = 14.35$ кэВ.

Замечание.

Паунд и Ребка использовали измерения частоты фотонов в двух точках вдоль их траектории: в точке испускания и в точке поглощения. Разность в измеренной частоте в верхней и нижней точках указывает на ее изменение в гравитационном поле. Гамма-квант с энергией 14.35 кэВ, испускаемый возбуждённым ядром ^{57}Fe в переходе на основное состояние, проходил расстояние h = 22.5 м по вертикали в поле тяготения Земли и резонансно поглощался мишенью из того же материала. При точном совпадении частот фотона в точке испускания и поглощения и отсутствии отдачи испускающего и поглощающего ядер вероятность поглощения максимальна (источник и поглотитель настроены в резонанс); при расхождении частоты фотона и поглотителя вероятность поглощения уменьшается, в зависимости от разности частот и остроты резонанса (то есть ширины линии поглощения).

1.4. Биографическое примечание

- **Планк**, Макс Карл Эрнст Людвиг (23.04.1858-4.10.1947), немецкий физик-теоретик, основоположник квантовой теории. День 14 декабря 1900 года, когда М. Планк доложил на заседании немецкого физического общества о теоретическом выводе закона излучения, стал датой рождения квантовой теории (Нобелевская премия 1918 г.). Работы относятся к термодинамике, теории теплового излучения, теории относительности, квантовой теории, истории и методологии физики, философии науки. Ввел фундаментальную постоянную с размерностью действия (постоянная Планка).

- **Кирхгоф** Густав Роберт (12.03.1824-17.10.1887), немецкий физик. Работы посвящены электричеству, механике, оптике, математической физике, теории упругости, гидродинамике. В 1845-1847 гг. открыл закономерности протекания электрического тока в разветвленных це-

ниях. Разработал метод спектрального анализа и открыл новые элементы (цезий 1860, рубидий 1861). Установил один из основных законов теплового излучения (1859 г.). Развил строгую теорию дифракции (1882 г.)

- **Вин** Вильгельм (13.01.1864 - 30.08.1928), немецкий физик, работы которого относятся к теории теплового излучения, оптике, термодинамике, гидродинамике, изучению электрических разрядов в газах. В 1893 г. показал, что максимум излучения в спектре абсолютно черного тела с увеличением температуры смещается в сторону коротких волн (Нобелевская премия 1911 г.). Исследовал электрическую проводимость в металлах, изучал катодные и рентгеновские лучи, измерил длину волны рентгеновского излучения.

- **Джинс** Джеймс Хопвуд (11.11.1877 - 16.09.1946), английский физик и астрофизик. Основные физические исследования посвящены кинетической теории газов и теории теплового излучения. В теории теплового излучения вывел формулу для плотности энергии. Работы Джинса посвящены также квантовой теории, математической теории электричества и магнетизма, теоретической механике, теории относительности.

- **Рэлей** Джон Уильям (12.11.1842 - 30.06.1919), английский физик. Работы посвящены теории колебаний, одним из основоположников которой он является, акустике, теории теплового излучения, молекулярной физике, гидродинамике, электромагнетизму, оптике. Исследовал колебания упругих тел. Изучал дифракцию, рассеяние и поглощение волн. Заложил основы теории молекулярного рассеяния света (1871 г.). Открыл новый химический элемент аргон и установил его свойства (Нобелевская премия 1904 г.). В 1900 г. вывел закон распределения энергии излучения в спектре абсолютно черного тела в зависимости от температуры.

- **Фридман**, Александр Александрович (16.06.1888-16.09.1925), Выдающийся российский и советский математик, физик и геофизик, создатель теории нестационарной Вселенной. Основные работы Фридмана посвящены проблемам динамической метеорологии (теории атмосферных вихрей и порывистости ветра, теории разрывов непрерывности в атмосфере, атмосферной турбулентности), гидродинамике сжимаемой жидкости, физике атмосферы и релятивистской космо-

логии. Мировую известность А.А. Фридман получил, создав модели нестационарной вселенной, где он предсказал в частности расширение Вселенной. Полученные им в 1922-1924 годах при исследовании релятивистских моделей Вселенной нестационарные решения уравнений Эйнштейна положили начало развитию теории нестационарной Вселенной. Учёный исследовал нестационарные однородные изотропные модели с пространством сначала положительной, а затем и отрицательной кривизны, заполненным пылевидной материей (с нулевым давлением). Нестационарность рассмотренных моделей описывается зависимостью радиуса кривизны и плотности от времени, причём плотность изменяется обратно пропорционально кубу радиуса кривизны.

- **Хаббл**, Эдвин Пауэлл (20.11.1889-23.09.1953), выдающийся американский астроном. В своих работах выполнил классификацию галактик, доказал существование островных галактик за пределами Млечного Пути, установил закон расширения Вселенной, доказал однородность Вселенной.

- **Гамов**, Георгий Антонович (04.03.1904-19.08.1968), выдающийся советский, американский физик. Работы посвящены теории альфа-распада, туннельному эффекту, капельной модели ядра, теории радиоактивности (бета-распада), теории эволюции звезд, теории релятивистской эволюции (Большого Взрыва).

2. КОРПУСКУЛЯРНЫЕ СВОЙСТВА ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

2.1. Корпускулярные свойства электромагнитного излучения. Фотоэффект. Эффект Комптона. Эффект Доплера. Краткая теория

М. Планк полагал, что квантовые свойства света проявляются только в актах излучения и поглощения, то есть при взаимодействии света с веществом. Распространение же света в пространстве происходит непрерывно и описывается классическими уравнениями Максвелла. Вот, что писал по этому поводу Г. Гамов:

Выпустив дух кванта из бутылки, сам М. Планк испытывал перед ним смертельный ужас и предпочитал считать, что порции энергии

проистекают не из свойств световых волн самих по себе, но скорее из внутренних свойств атомов, которые могут испускать и поглощать излучение только определенными дискретными порциями. Излучение похоже на масло, которое можно купить или вернуть в бакалейную лавку только в пакетах по четверть фунта, хотя масло, как таковое, может существовать в любом желаемом количестве.

В 1905 г. А. Эйнштейн, развивая идеи М. Планка, пришел к представлению о том, что при распространении света в пространстве он ведет себя подобно совокупности частиц - квантов света или фотонов (это слово введено в физику в 1926 г. Дж. Льюисом) с энергией $E = h \cdot \nu$. Такому кванту можно приписать и импульс, вводя 4-импульс $p_\mu = (\frac{E}{c}, \mathbf{p})$, $p_\mu p^\mu = p^2 = 0$, $|\mathbf{p}| = \frac{\hbar\omega}{c} = \hbar k$. Смысл квантовой теории света А. Эйнштейна состоит в том, что

1) Свет представляет собой газ из частиц с энергией $E = \hbar\omega$ и импульсом $p = \hbar k$,

2) При взаимодействии света с веществом происходит уничтожение одних и рождение других квантов света.

Запишем закон сохранения энергии-импульса при взаимодействии какой-нибудь микросистемы со светом. Пусть $(E, \mathbf{P})$ - энергия, импульс системы до взаимодействия, $(E', \mathbf{P}')$ - энергия, импульс системы после взаимодействия, $(\hbar\omega, \hbar\mathbf{k})$ - энергия, импульс фотона до взаимодействия, $(\hbar\omega', \hbar\mathbf{k}')$ - энергия, импульс фотона после взаимодействия. Тогда:

$$\hbar\omega + E = \hbar\omega' + E', \quad \hbar\mathbf{k} + \mathbf{P} = \hbar\mathbf{k}' + \mathbf{P}'. \tag{55}$$

Эта формула может быть использована для анализа различных физических процессов. Рассмотрим эффект Допплера с фотонной точки зрения в нерелятивистском приближении. Пусть источник света массы M движется в вакууме со скоростью v. Энергия источника складывается из кинетической энергии $\frac{Mv^2}{2}$ и внутренней энергии $\mathcal{E}$. При испускании света внутренняя энергия изменяется: $\mathcal{E} \to \mathcal{E}'$ Запишем закон сохранения энергии и импульса в этом случае:

$$\frac{Mv^2}{2} + \mathcal{E} = \frac{Mv'^2}{2} + \mathcal{E}' + \mathcal{E}_{\text{изл}}, \quad M\mathbf{v} = M\mathbf{v}' + \mathbf{p}_{\text{изл}}.$$

Из этих уравнений находим:

$$\mathcal{E} - \mathcal{E}' = \mathcal{E}_{\text{изл}} - \mathbf{v}\mathbf{p}_{\text{изл}} + \frac{\mathbf{p}_{\text{изл}}^2}{2M} \approx \mathcal{E}_{\text{изл}} - \mathbf{v}\mathbf{p}_{\text{изл}}.$$

Вводя угол θ между скоростью движения источника и импульсом излучения, получим:

$$\mathcal{E} - \mathcal{E}' = \mathcal{E}_{\text{изл}}(1 - \frac{v}{c}\cos\theta). \tag{56}$$

Пусть излучение - это фотон с энергией $\mathcal{E}_{\text{изл}} = h\nu'$. Обозначим ν частоту излучения в системе покоя источника: $\mathcal{E} - \mathcal{E}' = \mathcal{E}_{\text{изл}} = h\nu$. Тогда частота излучения в системе отсчета, относительно которой источник движется со скоростью v имеет вид:

$$\nu' = \frac{\nu}{1 - \frac{v}{c}\cos\theta}.$$

Эта формула верна только в первом порядке по отношению v/c, так как была получена в рамках нерелятивистской механики. Релятивистская формула для эффекта Допплера имеет вид:

$$\nu' = \nu\frac{\sqrt{1-\beta^2}}{1 - \beta\cos\theta}, \quad \beta = \frac{v}{c}.$$

Одним из явлений, подтверждающих гипотезу квантов света, является фотоэлектрический фотоэффект. Фотоэффект — это явление вырывания электронов из вещества при освещении его светом. Уравнение фотоэффекта было получено А.Эйнштейном:

$$h\nu = \frac{mv^2}{2} + A,$$

где A — работа выхода электрона из металла, v — скорость электрона. Из этого уравнения следует:

1. Максимальная кинетическая энергия электрона зависит от частоты света, а не от интенсивности.

2. Существует низкочастотная граница фотоэффекта ν_0, то есть такая частота, ниже которой фотоэффект не наблюдается: $h\nu_0 = A$.

Если энергия связи электронов в веществе значительно меньше энергии фотона $h\nu$, вызывающего фотоэффект, то в уравнении Эйнштейна можно пренебречь A

$$h\nu = \frac{mv^2}{2} = eV,$$

где кинетическая энергия вылетающего электрона выражена через ускоряющий потенциал. Если это уравнение прочитать справа налево

$$eV = h\nu, \tag{57}$$

то оно требует, чтобы за счет электрона с энергией eV получался фотон. Такой процесс превращения энергии быстро движущегося электрона в энергию фотона представляет собой возникновение рентгеновских лучей при торможении электронов. При торможении электронов возникает сплошной спектр рентгеновских лучей. При этом уравнение Эйнштейна требует, чтобы максимальная энергия получающихся при этом фотонов удовлетворяла уравнению (57). При бомбардировке вольфрамового антикатода электроны тормозятся, из-за чего возникает тормозное рентгеновское излучение. Сплошной спектр этого излучения ограничен со стороны коротких длин волн (см Рис. 8). Эмпирически было найдено:

$$\lambda_{min} V = const.$$

Это соответствует уравнению Эйнштейна с максимальной частотой $\nu_{max} = eV/h = c/\lambda_{min}$:

$$\lambda_{min} = \frac{hc}{e}\frac{1}{V} = \frac{12.40}{V} A, \qquad (58)$$

где V берется в киловольтах. Уравнение (58) определяет коротковолновую границу рентгеновского спектра.

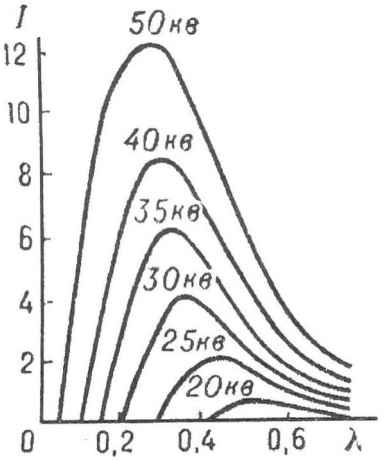

Рис. 8. Сплошной спектр рентгеновского излучения.

Известно, что гипотеза квантов света натолкнулась на очень большие трудности и что на нее долгое время смотрели, как на своеобразную ошибку молодости А. Эйнштейна, которую ему прощали лишь из-за больших

заслуг в других областях. Даже экспериментальное подтверждение Милликеном законов фотоэффекта никого не убедило, в том числе и самого Милликена. Отношение к этому вопросу изменилось лишь в 1922 г. после экспериментального открытия эффекта Комптона.

В 1922 г. Артур Комптон открыл явление, которое как и фотоэффект подтверждает гипотезу квантов света. Он изучал рассеяние жесткого рентгеновского излучения на веществах, в которых электроны слабо связаны с атомом (парафин, графит). Исследовалась зависимость частоты рассеянных рентгеновских лучей от угла рассеяния. Рассмотрим столкновение фотона со свободным электроном, которое показано на Рис.2.

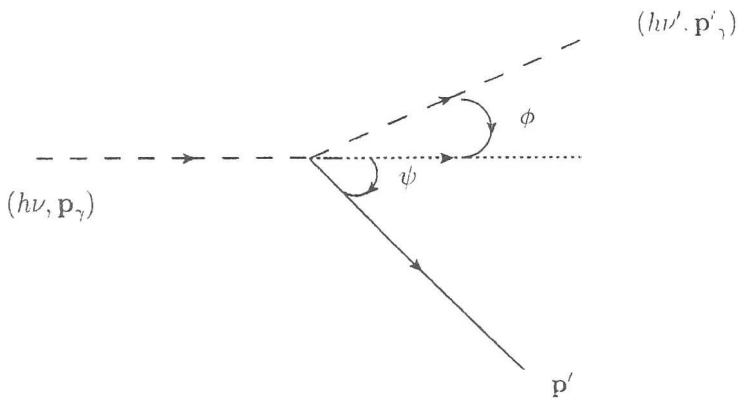

Рис. 9. Диаграмма рассеяния фотона на электроне.

Запишем законы сохранения энергии и импульса в рамках релятивистской механики:

$$h\nu = h\nu' + \sqrt{\mathbf{p}'^2c^2 + m^2c^4} - mc^2,$$

$$p_\gamma = p'_\gamma \cos\phi + p' \cos\psi,$$

$$p'_\gamma \sin\phi = p' \sin\psi.$$

Исключая из рассмотрения угол ψ, находим основное уравнение эффекта Комптона:

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \frac{h}{mc}(1 - \cos\phi) = 2\lambda_C \sin^2\frac{\phi}{2}, \quad \lambda_C = \frac{h}{mc} \approx 2.4 \cdot 10^{-10} \text{ см}. \quad (59)$$

2.2. Примеры решения задач

Задача 1. *Лазер излучает в импульсе длительностью t=0.13 мс узкий пучок света энергией E=10 Дж. Найти среднее за время t давление такого пучка света, если его сфокусировать в пятнышко диаметром d—10 мкм на поверхности, перпендикулярной пучку, с коэффициентом отражения* $\rho = 0.50$.

Решение:

Пусть энергия одного фотона $\varepsilon = \hbar\omega$, тогда число фотонов в пучке света с энергией E равно $N = E/\hbar\omega$, число отраженных фотонов $N_1 = \rho N$, поглащенных-$N_2 = N - N_1 = N(1-\rho)$. Изменение импульса отраженного фотона $\Delta p_1 = 2\hbar\omega/c$, поглащенного-$\Delta p_2 = \hbar\omega/c$. Изменение импульса всех фотонов в пучке $\Delta P = N_1\Delta p_1 + N_2\Delta p_2 = \frac{\hbar\omega}{c}N(1+\rho) = \frac{E}{c}(1+\rho)$. По второму закону Ньютона средняя сила, действующая на поверхность и среднее давление равны:

$$< F >= \frac{\Delta P}{t}, \quad < \mathrm{P} >= \frac{< F >}{S}$$

где S-площадь пятнышка. После подстановки и упрощения получаем ответ задачи в виде:

$$< P >= 4E\frac{(1+\rho)}{\pi d^2 ct} = 4\cdot 10\text{Дж}\frac{1}{2\pi^2\cdot 10^{-10}\text{м}^2\cdot 0.13\cdot 10^{-6}c\cdot 3\cdot 10^{8}\frac{\text{м}}{c}} = 5\ M\text{Па}.$$

Задача 2. *Фотон с энергией превышающей энергию покоя электрона в* $n = 1.5$ *раза, испытал лобовое столкновение с покоящимся электроном, который находится в однородном магнитном поле. В результате электрон отдачи стал двигаться по окружности радиуса* $r = 2.9$ *см. Найти напряженность магнитного поля* H.

Решение:

Столкновение фотона со свободным покоящимся электроном приводит к изменению длины волны рассеянного фотона в соответствии с eqrefeq:compton: $(\lambda - \lambda_0) = 2\lambda_c sin^2(\theta/2)$ (эффект Комптона $\lambda_c = 2\pi\hbar/mc$-комптоновская длина волны электрона). При лобовом столкновении $\theta = \pi$.

Используя соотношение де Бройля для импульса частицы $p = 2\pi\hbar/\lambda$, найдем импульс фотона после столкновения:

$$p = \frac{2\pi\hbar}{(\lambda_0 + 2\lambda_c)}.$$

Импульс фотона до взаимодействия найдем из начальной энергии: $p_0 = n \cdot mc$, где m-масса электрона. Импульс электрона после столкновения найдем из соответствующего закона сохранения, учитывая то, что здесь рассматривается случай лобового соударения:

$$v_e = p + p_0 = \frac{2mcn(1+n)}{(1+2n)}.$$

Для того, чтобы ответить на вопрос задачи небходимо записать условие движения частицы с импульсом p по окружности в магнитном поле:

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{e}{c}vH, \quad p = mv = \frac{reH}{c},$$

где e-заряд электрона. Из двух последних уравнений для импульса электрона p находим напряженность магнитного поля:

$$H = \frac{2mc^2n(1+n)}{er(1+2n)} = 1.1 \text{ кЭ}.$$

Задача 3. *Напряжение на рентгеновской трубке увеличили в $\eta = 1.5$ раза. В результате длина волны коротковолновой границы сплошного рентгеновского спектра изменилась на $\Delta\lambda = 26$ пм. Определить исходное напряжение на трубке.*

Решение:

Из полученной выше формулы (58) следует, что при увеличении напряжения на рентгеновской трубке от U_1 до U_2 длина волны коротковолновой границы сплошного рентгеновского спектра уменьшается от λ_1 до λ_2:

$$\frac{U_2}{U_1} = \frac{\lambda_1}{\lambda_2}.$$

По условию задачи $U_2 = \eta \cdot U_1$, $\lambda_2 = \lambda_1 - \Delta\lambda$. В результате находим:

$$\eta = \frac{\lambda_1}{\lambda_1 - \Delta\lambda}, \quad \lambda_1 = \frac{\Delta\lambda}{1 - \frac{1}{\eta}}.$$

Тогда из (58) находим величину первоначального напряжения на рентгеновской трубке:

$$U_1 = \frac{hc}{e\Delta\lambda}\left(1 - \frac{1}{\eta}\right) = 16.0 \text{ кВ}.$$

2.3. Задачи для самостоятельного решения

1. С какой скоростью должен двигаться электрон, чтобы его импульс был равен импульсу фотона, длина волны которого равна 1.0 пм?

2. Атомы, летящие со скоростью v, испускают в направлении своего движения фотоны, частота которых ν_0. Какова частота фотонов, испускаемых под углом 45^o? Импульс фотона значительно меньше импульса атома.

3. Глаз человека еще способен ощущать попадающее в него излучение мощностью $W = 3.6 \cdot 10^{-17}$ Вт, если его длина волны $\lambda = 550$ нм, что соответствует максимуму спектральной чувствительности глаза. Какое количество фотонов содержится в таком пучке света?

4. При некотором максимальном значении задерживающей разности потенциалов фототок с поверхности лития, освещаемого светом с длиной волны λ_0, прекращается. Изменив длину волны света в n=1.5 раза, установили, что для прекращения тока необходимо увеличить задерживающую разность потенциалов в m=2.0; раза. Вычислить λ_0.

5. Показать с помощью законов сохранения энергии и импульса, что свободный электрон не может поглатить фотон.

6. При облучении вещества жестким монохроматическим рентгеновским излучением обнаружено, что максимальная кинетическая энергия комптоновских электронов $T_{max} = 0.44$ Мэв. Определить длину волны падающего излучения.

7. Найти энергию налетающего фотона, если известно, что при рассеянии под углом $\theta = 60^0$ на покоящемся свободном электроне последний приобрёл кинетическую энергию $T = 0.450$ Мэв.

8. Над центром круглой абсолютно зеркальной пластинки радиусом $r = 10$ см находится точечный источник света мощностью $N = 60$ Вт. Расстояние между источником и пластинкой $l = 10$ см. Найти с помощью корпускулярных представлений силу светового давления, которую испытывает пластинка. Рассмотреть случаи $r \ll l$ и $r \gg l$.

9. Найти длину волны коротковолновой границы сплошного рентгеновского спектра, если известно, что после увеличения напряжения на рентгеновской трубке в 2.0 раза она изменилась на 0.50 Å.

10. Медный шарик, удаленный от других тел, облучают светом с длиной волны 0.20 мкм. До какого максимального потенциала зарядится шарик?

11. Найти максимальную кинетическую энергию фотоэлектронов, вырванных с поверхности лития электромагнитным излучением, напряжённость электрической составляющей которого меняется во времени по закону $E = a(1 + cos\omega t)cos\omega_0 t$, где a-постоянная, $\omega = 6.0 \quad 10^{14}$ рад/с, $\omega_0 = 3,60 \cdot 10^{15}$ рад/с.

12. Фотон с импульсом 60 кэВ/с, испытав комптоновское рассеяние под углом 120^0 на покоившемся свободном электроне, вырвал затем из атома молибдена электрон, энергия связи которого 20.0 кэВ. Найти кинетическую энергию фотоэлектрона.

13. На какой угол рассеялся γ-квант с энергией 0.80 МэВ в результате столкновения с покоящимся свободным электроном, если скорость электрона отдачи оказалась равной 0.60 с?

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

15. Найти с помощью корпускулярных представлений силу светового давления, которую оказывает плоский световой поток с интенсивностью $I = 1.0$ Вт/см^2 на плоскую зеркальную поверхность, если угол падения $\theta = 30^o$ и площадь освещаемой поверхности $S = 10$ см^2

16. При трехфотонной аннигиляции ортопозитрония оказалось, что углы между направлениями вылета фотонов $\theta_{12} = 120^o$ и $\theta_{13} = 150^o$. Найти энергию фотонов, считая, что ортопозитроний вначале покоился.

2.4. Биографическое примечание

- **Эйнштейн**, Альберт (14.03.1879-18.04.1955), выдающийся физик-теоретик, один из основателей современной физики. Разработал основы специальной теории относительности. Ввел представление о дискретной квантовой структуре светового излучения. В рамках квантовой теории света объяснил такие явления как фотоэффект, правило Стокса для флюоресценции, фотоионизацию и др. (Нобелевская премия 1921 г.). Разработал квантовую теорию теплоемкости твердых тел. Предсказал явление индуцированного излучения. Развил молекулярно-статистическую теорию броуновского движения. Создал квантовую статистику частиц с целым спином. Предсказал изменение механического момента при намагничивании тела. Создал общую теорию относительности или современную релятивистскую теорию тяготения.

- **Комптон**, Артур Холли (10.09.1892-15.03.1962), американский физик. Работы посвящены атомной и ядерной физике, физике космических лучей. Открыл явление изменения длины волны рентгеновского излучения при рассеянии его электронами вещества и построил его теорию (Нобелевская премия 1927 г.). Наблюдал явление полного внутреннего отражения рентгеновских лучей.

3. МОДЕЛЬ АТОМА РЕЗЕРФОРДА-БОРА. КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ БОРА-ЗОММЕРФЕЛЬДА

3.1. Модель атома Резерфорда-Бора. Квантовая теория Бора-Зоммерфельда. Краткая теория

На основе экспериментального изучения оптических спектров во второй половине 19 века было установлено, что для свободных атомов характерны линейчатые спектры, состоящие из отдельных спектральных линий, а для молекул характерны полосатые спектры, состоящие из отдельных полос, сравнительно узких для простейших молекул и очень широких для

сложных молекул. Изучение линейчатых спектров показало, что каждому элементу соответствует свой атомный линейчатый спектр, и это легло в основу открытого Р. Бунзеном и Г. Кирхгофом в 1859 году спектрального анализа, позволяющего определить химический состав веществ по их спектрам. Ряд элементов был открыт спектральным методом, а по спектрам Солнца и звезд был определен их химический состав.

Спектральные линии атома водорода, наблюдаемые в видимой и в близкой ультрафиолетовой областях спектра, образуют правильную последовательность – спектральную серию. В 1885 г. швейцарский математик И. Бальмер нашел, что частоты (волновые числа) видимых спектральных линий водорода (см. рис.7) выражаются простой формулой:

$$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n = 3, 4, 5. \ldots \tag{60}$$

постоянная R_H называется постоянной Ридберга. Совокупность этих линий получила название серии Бальмера. В 1906 г. Т. Лайман открыл еще одну серию в далекой ультрафиолетовой области. Позднее Ф. Пашен (1908 г.), Ф. Брэкет (1922 г.), А. Пфунд (1924 г.) нашли новые серии в инфракрасной области.

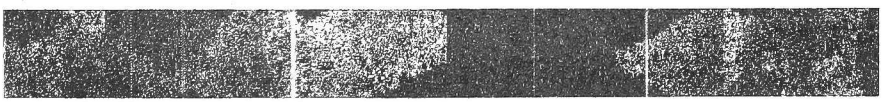

Рис. 10. Видимые линии излучения водорода в серии Бальмера. H_α – красная линия справа, имеющая длину волны 656.3 нм. Самая левая линия – H_ϵ, соответствует излучению уже в ультрафиолетовой области спектра на длине волны 397.0 нм.

В 1908 г. В. Ритцем был установлен основной закон спектроскопии - *комбинационный принцип Ритца*. Согласно комбинационному принципу волновые числа всех спектральных линий атома данного элемента могут быть представлены как разности двух членов полного набора спектральных термов $\bar{\nu} = T(n_1) - T(n_2)$, характеризующего этот атом. Составляя различные разности спектральных термов атома, можно найти волновые числа всех его возможных спектральных линий. Термы, которые сопоставлялись каждому атому, принято считать положительными. С ростом номера терма его величина уменьшалась. Если $n_1 < n_2$, то $T_{n_1} > T_{n_2}$. Если фиксировать n_1 и придавать n_2 все возможные значения, начиная с $n_1 + 1$, ..., то получится

система линий, называемая спектральной серией:

$$\bar{\nu}_1 = T(n_1) - T(n_1+1),\ \bar{\nu}_2 = T(n_1) - T(n_1+2),\ \bar{\nu}_3 = T(n_1) - T(n_1+3), \ldots \quad (61)$$

Рассмотрим две спектральные линии одной и той же серии:

$$\bar{\nu}_{12} = T(n_1) - T(n_2),\ \bar{\nu}_{13} = T(n_1) - T(n_3),\ n_2 > n_3. \quad (62)$$

Тогда, вычитая из одного равенства другое, получим:

$$\bar{\nu}_{12} - \bar{\nu}_{13} = T(n_3) - T(n_2). \quad (63)$$

Видим, что эта разность есть волновое число другой спектральной серии того же атома. Для атома водорода спектральный терм удалось выразить в виде простой аналитической формулы $T(n) = R_H/n^2$ с хорошей степенью точности.

Формула Планка для энергии линейного гармонического осциллятора $E = n\hbar\omega$ означает, что отношение $\frac{E}{\omega}$ принимает дискретные значения $\hbar n$. Это отношение является адиабатическим инвариантом гармонического осциллятора. В результате формула Планка для линейного гармонического осциллятора может быть записана в виде следующего квантового условия:

$$\oint p dq = nh. \quad (64)$$

Правило квантования (64) можно применять не только к системам с одной степенью свободы, но и к сложным системам со многими степенями свободы с разделяющимися переменными. Н. Бор и А. Зоммерфельд развили теорию описания движения микросистем, которая получила название квантовой теории Бора-Зоммерфельда. Она состоит в следующем:

1. Для описания движения микроскопических систем можно использовать законы классической механики, определять траекторию движения, находить закон движения, интегралы движения.

2. В природе реализуются не все возможные с точки зрения классической механики движения, а лишь те из них, которые подчиняются квантовым условиям:

$$\oint p_1 dq_1 = n_1 h,\ \oint p_2 dq_2 = n_2 h,\ \oint p_3 dq_3 = n_3 h \ldots. \quad (65)$$

Рассмотрим описание атома водорода в рамках квантовой теории Бора-Зоммерфельда, когда частицы движутся по эллиптическим траекториям.

Функции Лагранжа и Гамильтона рассматриваемой системы имеют вид (введены полярные координаты на плоскости движения):

$$L = \frac{\mu}{2}(\dot{r}^2 + r^2\dot{\phi}^2) + \frac{Ze^2}{r}, \quad H = \frac{\mu}{2}(\dot{r}^2 + r^2\dot{\phi}^2) - \frac{Ze^2}{r}.$$

Вычислим обобщенные импульсы:

$$p_r = \frac{\partial L}{\partial \dot{r}} = \mu\dot{r}, \quad p_\phi = \frac{\partial L}{\partial \dot{\phi}} = \mu r^2\dot{\phi}.$$

Воспользуемся также известным выражением для траектории движения:

$$r = \frac{p}{1 + \epsilon\cos\phi}, \quad p = \frac{M_0^2}{\mu Ze^2}, \quad \epsilon^2 = 1 + \frac{2E_0M_0^2}{\mu(Ze^2)^2}.$$

Выразим из последнего равенства полную энергию системы:

$$E = (\epsilon^2 - 1)\frac{\mu(Ze^2)^2}{2M_0^2} = -\frac{Ze^2}{2a}, \quad a = \frac{p}{1 - \epsilon^2}, \tag{66}$$

a-большая полуось эллипса, E и M_0 — интегралы энергии и момента импульса системы. Перейдем теперь к квантовым условиям, которые накладывают определенные ограничения на движение системы:

$$\oint p_r dr = n_r h, \quad \oint p_\phi d\phi = n_\phi h.$$

Рассмотрим первое квантовое условие:

$$n_r h = \oint p_r dr = \oint \mu\dot{r} dr = \oint \mu\left(\frac{dr}{d\phi}\right)^2 \frac{p_\phi}{\mu r^2} d\phi = p_\phi \oint \frac{1}{r^2}\left(\frac{dr}{d\phi}\right)^2 d\phi.$$

Преобразуем подинтегральное выражение, используя уравнение траектории движения:

$$\frac{dr}{d\phi} = \frac{\epsilon p\sin\phi}{(1 + \epsilon\cos\phi)^2}, \frac{1}{r^2}\left(\frac{dr}{d\phi}\right)^2 = \frac{\epsilon^2\sin^2\phi}{(1 + \epsilon\cos\phi)^2}.$$

Подставляя это выражение в условие квантования, выполним интегрирование по частям:

$$n_r h = p_\phi \oint \frac{\epsilon^2\sin^2\phi}{(1 + \epsilon\cos\phi)^2} d\phi = p_\phi \left[\frac{\epsilon\sin\phi}{1 + \epsilon\cos\phi}\Big|_0^{2\pi} - \int_0^{2\pi} \frac{\epsilon\cos\varphi}{1 + \epsilon\cos\phi} d\phi\right] =$$

$$= -p_\phi \int_0^{2\pi} \frac{\epsilon \cos\phi}{1+\epsilon\cos\phi} d\phi = p_\phi \cdot I.$$

Для одного и того же интеграла получены два выражения:

$$I = -\int_0^{2\pi} \frac{\epsilon\cos\phi}{1+\epsilon\cos\phi} d\phi, \quad I = \int_0^{2\pi} \frac{\epsilon^2 \sin^2\phi}{(1+\epsilon\cos\phi)^2} d\phi.$$

Для вычисления интеграла I умножим первую формулу на коэффициент 2, а вторую на (-1) и сложим полученные выражения:

$$I = -\int_0^{2\pi} \frac{\epsilon^2 + \epsilon^2\cos^2\phi + 2\epsilon\cos\phi + 1 - 1}{(1+\epsilon\cos\phi)^2} d\phi = -2\pi + (1-\epsilon^2)\int_0^{2\pi} \frac{d\phi}{(1+\epsilon\cos\phi)^2} =$$

$$= -2\pi + \frac{1-\epsilon^2}{p^2}\int_0^{2\pi} r^2 d\phi = -2\pi + \frac{2(1-\epsilon^2)}{p^2}\pi a\cdot b = -2\pi + 2\pi\frac{1}{\sqrt{1-\epsilon^2}}.$$

Таким образом, первое условие квантования принимает окончательный вид:

$$n_r h = -2\pi p_\phi + \frac{2\pi p_\phi}{\sqrt{1-\epsilon^2}}.$$

Второе условие квантования:

$$n_\phi h = \oint p_\phi d\phi = 2\pi p_\phi.$$

Складывая два последних выражения, получим:

$$(n_r + n_\phi)h = n\cdot h = \frac{2\pi p_\phi}{\sqrt{1-\epsilon^2}}.$$

Имея ввиду формулу для большой полуоси эллипса (66), получим условие ее квантования в виде:

$$a_n = \frac{(n_r+n_\phi)^2 h^2}{4\pi^2 \mu Z e^2} = \frac{n^2 h^2}{\mu Z e^2}.$$

Поскольку полная энергия системы выражается через a, находим условие квантования уровней энергии:

$$E_n = -\frac{\mu(Ze^2)^2}{2n^2\hbar^2}.$$

Несмотря на усложнение задачи, мы получили известную формулу Бора как и при изучении круговых орбит. Обобщенная формула Бальмера для

частот излучения при переходе из одного стационарного состояния в другое имеет вид:

$$\omega_{nm} = \frac{\mu(Ze^2)^2}{2\hbar^3}\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right), \quad \nu_{nm} = \frac{\mu(Ze^2)^2}{4\pi\hbar^3}\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right)$$

Переписывая последнюю формулу для волнового числа $\tilde{\nu}_{nm}$, получим аналитическое выражение для постоянной Ридберга R_H:

$$\tilde{\nu}_{nm} = \frac{\mu(Ze^2)^2}{4\pi c\hbar^3}\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right), \quad R_H = R_{H\,\infty}\frac{1}{1+\frac{m_e}{m_p}} = \frac{\mu e^4}{4\pi c\hbar^3},$$

$$R_{H\,\infty} = 109737.31568539(55)\ \text{см}^{-1}$$

Экспериментальное исследование структуры атома было выполнено в опыте Э. Резерфорда в 1909-1911 гг. В этом эксперименте Э. Резерфорд и его сотрудники Э. Марсден и Х. Гейгер бомбардировали α-частицами с энергией 5 МэВ (скорость 10^7 м/с), испускаемыми радиоактивными веществами, очень тонкие металлические фольги (золото, серебро, медь и др., $d = 10^{-5} - 10^{-4}$ см). Для регистрации рассеянных α-частиц применялся визуальный метод. При ударе о флуоресцирующий экран из сернистого цинка α-частица оставляла на нем вспышку (сцинтилляцию). Подавляющее большинство α-частиц рассеивалось на малые углы $1 \div 3^o$. Однако наблюдались отдельные α-частицы, отклоняющиеся на большие углы до 150^o. Э. Резерфорд сделал вывод, что каждое отклонение на большой угол появляется в результате единичного акта взаимодействия какого-то точечного силового центра в атоме с близко пролетающей α-частицей. Если предположить наличие в атоме ядра, то отклонение на большие углы возникает при электрическом взаимодействии двух ядер.

Для описания эксперимента воспользуемся известным соотношением из классической механики между прицельным параметром b и углом рассеяния χ:

$$\operatorname{ctg}\frac{\chi}{2} = \frac{mbv^2}{2Ze^2}, \tag{67}$$

где заряд альфа-частицы равен $2e$, заряд ядра равен Ze, v-скорость альфа-частицы вдали от ядра. Пусть dN-число частиц рассеянных под углами, лежащими в интервале $\chi \div \chi + d\chi$. Вводя также плотность потока падающих частиц, запишем дифференциальное эффективное сечение рассеяния альфа-частиц на силовом центре (формула Резерфорда):

$$d\sigma = \frac{dN}{I} = 2\pi b db = \frac{(Ze^2)^2}{(mv^2)^2}\frac{d\Omega}{\sin^4\frac{\chi}{2}}, \quad d\Omega = 2\pi\sin\chi d\chi. \tag{68}$$

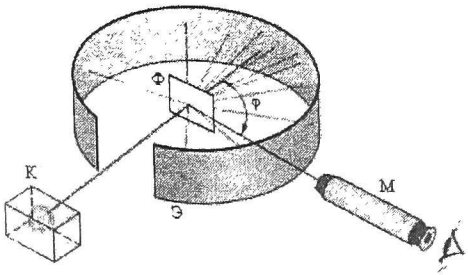

Рис. 11. Схема опыта Резерфорда по рассеянию α-частиц. К - свинцовый контейнер с радиоактивным веществом, Э - экран, покрытый сернистым цинком, Ф - золотая фольга, М - микроскоп.

Если n-число ядер в единице объема, то в объеме V имеем $n \cdot V$ силовых центров. Поэтому число частиц dN будет равно:

$$dN = V \cdot n \cdot I \cdot d\sigma = V \cdot n \cdot I \left(\frac{Ze^2}{mv^2}\right)^2 \frac{d\Omega}{\sin^4 \frac{\chi}{2}}. \tag{69}$$

В таком виде формула Э. Резерфорда была подтверждена на опыте. В частности было показано, что при постоянном $d\Omega$ произведение $dN \cdot \sin^4 \frac{\chi}{2}$ не зависит от угла рассеяния.

В 1913 г. Н. Бор сформулировал два постулата:

1. Из бесконечного множества электронных орбит, возможных с точки зрения классической механики, осуществляются только некоторые, удовлетворяющие квантовым условиям. Находясь на таких орбитах электрон не излучает энергию.

2. Излучение испускается или поглощается в виде кванта энергии $\hbar\omega$ при переходе электрона из одного стационарного состояния в другое:

$$\hbar\omega_{nm} = E_n - E_m. \tag{70}$$

Одно из весьма веских доказательств дискретности энергетических уровней было получено в опыте Франка-Герца (см. рис.9). В баллоне с парами ртути имелись три электрода К, А, С. В пространстве между электродами К-С происходит ускорение электронов, вылетевших с катода К. Затем они замедляются между электродами С-А слабым тормозящим полем 0.5 В. До анода долетают только такие электроны, которые имеют после прохождения сетки энергию больше 0.5 эВ. Зависимость анодного тока от ускоряющей разности потенциалов V представлена на рис.9. Максимумы

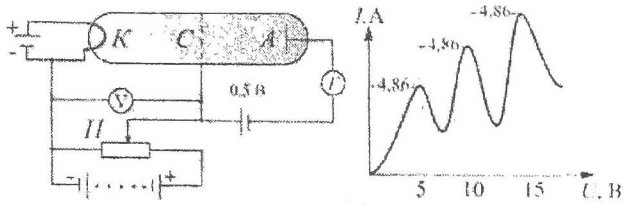

Рис. 12. Опыт Франка-Герца. Вольт-амперная характеристика.

тока соответствуют значениям энергии электрона 4.9 эВ, 9.8 эВ, 14.7 эВ и т.д. Такой вид кривой объясняется тем, что атомы ртути могут поглощать лишь дискретные порции энергии, равные 4.9 эВ.

3.2. Примеры решения задач

Задача 1. *Найти вероятность того, что $\alpha-$частица с кинетической энергией $T_\alpha = 3.0$ МэВ при прохождении свинцовой фольги толщиной $d = 1.5$ мкм рассеется в интервале углов $60^o - 90^o$.*

Решение

Воспользуемся формулой Резерфорда, которая задаст относительное число частиц, рассеянных в элементарном телесном угле $d\Omega$ под углом χ к первоначальному направлению их движения:

$$\frac{dN}{N} = n\left(\frac{q_1 q_2}{4T_\alpha}\right)^2 \frac{d\Omega}{\sin^4(\chi/2)}.$$

Здесь: $n-$число ядер мишени на единицу площади ее поверхности, $q_1 = 2e$ - заряд α-частицы, $q_2 = Ze$ - заряд ядра свинца. Величину n легко найти из условий задачи: $n = N_A \rho d/\mu$, где N_A - число Авагадро, μ - молярная масса свинца, ρ - плотность свинца. $dP(\Omega) = dN/N$ есть вероятность рассеяния в элементарный телесный угол. Чтобы найти вероятность рассеяния в конечный интервал углов, необходимо проинтегрировать дифференциальную вероятность по $d\Omega = d\phi \sin(\chi) d\chi$. Учитывая, что

$$\int \frac{\sin(\chi)d\chi}{\sin^4(\chi/2)} = -\frac{2}{\sin^2(\chi/2)},$$

получаем искомую вероятность:

$$P = \pi n \left(\frac{Ze^2}{T_a}\right)^2 \left(\frac{1}{\sin^2(\chi_1/2)} - \frac{1}{\sin^2(\chi_2/2)}\right) = 5 \cdot 10^{-4}.$$

Задача 2. *Найти для водородоподобных ионов радиус n-ой боровской орбиты и скорость электрона на ней, кинетическую энергию электрона T_e и его энергию связи $\mathcal{E}$ в основном состоянии, а также потенциал ионизации ϕ_i.*

Решение

Электрон движется в плоскости, его движение определяется координатами r и ϕ. Функция Лагранжа электрона имеет вид:

$$L = T - U = \frac{m}{2}(\dot{r}^2 + r^2\dot{\phi}^2) - \frac{Ze^2}{r}.$$

При движении по окружности постоянного радиуса $\dot{r} = 0$ и $p_\phi = \partial L/\partial\dot{\phi} = mvr$, где $v = r\dot{\phi}$. Используем правило квантования Бора для круговых орбит:

$$p_\phi = pr = n\hbar, \quad \text{где } n = 1, 2, \ldots$$

Полная энергия электрона в водородоподобном ионе равна:

$$E = \frac{mv^2}{2} - \frac{Ze^2}{r}.$$

Из второго закона Ньютона следует, что импульс и радиус орбиты электрона связаны соотношением:

$$\frac{Ze^2}{r^2} = m \cdot W = m\frac{v^2}{r} = \frac{p^2}{mr},$$

где W – ускорение электрона при движении по круговой орбите. Используя правило квантования Бора, находим последовательно радиус орбиты, скорость и кинетическую энергию электрона на орбите:

$$r_n = \frac{n^2\hbar^2}{mZe^2}, \quad v_n = \frac{Ze^2}{\hbar n}, \quad T_n = \frac{mZ^2e^4}{2\hbar n^2}.$$

Энергия связи электрона в водородоподобном ионе равна (в основном состоянии $n = 1$):

$$\mathcal{E}_n = T_n - \frac{Ze^2}{r_n} = -\frac{m(Ze^2)^2}{2n^2\hbar^2},$$

а потенциал ионизации $\phi_i = \mathcal{E}/e$.

Задача 3. *С какой минимальной скоростью должен двигаться атом водорода, чтобы в результате неупругого лобового соударения с другим, покоящимся атомом водорода, один из них испустил фотон ? До соударения оба атома находились в основном состоянии.*

Решение

Запишем законы сохранения энергии и импульса при неупругом соударении движущегося атома с покоящимся:

$$P = P', \quad \frac{P^2}{2M} = \frac{P'^2}{4M} + \Delta E,$$

где P - импульс налетающего атома, P' - суммарный импульс двух атомов после неупругого удара, которые движутся как одно целое с массой $2M$, ΔE энергия возбуждения одного из атомов, $M \gg \Delta E$ масса атома водорода. Отсюда нетрудно найти связь между скоростью налетающего атома и энергией возбуждения:

$$v = \frac{P}{M} = \sqrt{\frac{4\Delta E}{M}}.$$

Минимальная энергия возбуждения, достаточная для излучения фотона равна:

$$\Delta E_{min} = \hbar\omega_{min} = \hbar cR\left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2}\right) = \frac{3}{4}\hbar cR.$$

где R - постоянная Ридберга. Таким образом, минимальная скорость атома, достаточная для того, чтобы при соударении излучился фотон есть:

$$v_{min} = \sqrt{\frac{3\hbar cR}{M}}.$$

Задача 4. *Согласно постулату Бора-Зоммерфельда, при периодическом движении частицы в потенциальном поле должно выполняться*

следующее правило квантования:

$$\oint pdq = 2\pi\hbar n,$$

где q и p — обобщенные координата и импульс, n — целое число. Найти с помощью этого правила разрешенные значения энергии E частицы массы m, которая движется:

1. В одномерной прямоугольной потенциальной яме шириной l с бесконечно высокими стенками,

2. По окружности радиуса r.

Решение

1. Рассмотрим движение материальной точки внутри ямы с бесконечно высокими стенками. Внутри ямы частица движется с постоянным импульсом p от стенки до стенки. Запишем условие квантования Бора-Зоммерфельда:

$$\oint pdq = 2\int_0^l pdx = 2pl = 2\pi\hbar n.$$

Отсюда находим последовательно импульс и энергию частицы:

$$p = \frac{\pi\hbar n}{l}, \quad E = \frac{\pi^2 n^2 \hbar^2}{2ml^2}.$$

2. При движении по окружности постоянного радиуса обобщенная координата $q = \phi$, обобщенный импульс $p_\phi = mvr$. Условие квантования дает в этом случае:

$$\oint p_\phi d\phi = mvr\int_0^{2\pi} d\phi = 2\pi mvr = 2\pi\hbar n; \; mv = \frac{\hbar n}{r},$$

$$E_n = \frac{mv^2}{2} - \frac{Ze^2}{r} = -\frac{Ze^2}{2r} = -\frac{m(Ze^2)^2}{2n^2\hbar^2}.$$

Задача 5. *Найти минимальное расстояние, на которое протон с кинетической энергией $T_p = 0.87$ МэВ приблизится к покоящемуся ядру атома ртути при рассеянии на угол $\theta = 90^o$. Сравнить это расстояние с соответствующим значением прицельного параметра b.*

Решение:

Между протоном и ядром ртути действуют силы кулоновского отталкивания. Минимальное расстояние, на которое протон приблизится к ядру определяется следующим условием:

$$E = U_{eff}, \quad T = \frac{M^2}{2mr^2} + \frac{Ze^2}{r}, \tag{71}$$

где момент импульса протона $M = mvb$, b- прицельный параметр, полная энергия протона равна его кинетической энергии, которая известна по условию задачи. Поскольку прицельный параметр связан с углом рассеяния условием

$$\tan\frac{\theta}{2} = \frac{Ze^2}{2bT}, \tag{72}$$

то отсюда находим, что $b = \frac{Ze^2}{2T}$. В результате условие, определяющее минимальное расстояние между протоном и ядром ртути, примет вид:

$$V^2 + 4TV - 4T^2 = 0, \tag{73}$$

где введено обозначение $V = Ze^2/r$. Решая последнее уравнение, находим:

$$V = 2T(\sqrt{2} - 1), \quad r_{min} = \frac{Ze^2}{2T(\sqrt{2} - 1)} \approx 2.4 \cdot b = 0.16 \text{ нм}. \tag{74}$$

Задача 6. *Оценить время, за которое электрон, движущийся вокруг ядра водорода по орбите радиуса $a_0 = 0.5 \times 10^{-8}$ см, упал бы на ядро, если бы он терял энергию на излучение в соответствии с классической теорией по закону:*

$$\frac{dE}{dt} = -\frac{2e^2}{3c^3}\mathbf{W}^2, \tag{75}$$

где $\mathbf{W}$ *ускорение электрона. Считать, что вектор ускорения всегда направлен к центру атома.*

Решение:

Рассмотрим уравнение движения электрона по окружности (нормальное ускорение направлено к ядру, как и сила притяжения):

$$m\frac{v^2}{r} = \frac{e^2}{r^2}, \quad \frac{mv^2}{2} = \frac{e^2}{2r} \tag{76}$$

Тогда полная энергия электрона примет вид:

$$E = \frac{mv^2}{2} - \frac{e^2}{r} = -\frac{e^2}{2r} \tag{77}$$

Вычислим производную энергии E по времени:

$$\frac{dE}{dt} = \frac{e^2}{2r^2}\frac{dr}{dt} = -\frac{2e^2}{3c^3}\left(\frac{e^2}{mr^2}\right)^2 \tag{78}$$

Разделяя переменные r и t, получим и проинтегрируем уравнение:

$$r^2 dr = -\frac{4e^4}{3c^3m^2}dt, \quad \frac{r^3}{3}\Big|_{a_0}^{a} = -\frac{4e^4}{3m^2c^3}t, \quad a(t)^3 = a_0^3 - \frac{4e^4}{m^2c^3}t. \tag{79}$$

За время $\tau = a_0^3\frac{m^2c^3}{4e^4} \approx 10^{-11}$ с. электрон излучает энергию и упадет на ядро.

3.3. Задачи для самостоятельного решения

1. Найти минимальное расстояние, на которое протон с кинетической энергией $T_p = 0.39$ МэВ приблизится к покоящемуся ядру атома ртути при рассеянии на угол $\theta = 60^o$. Сравнить это расстояние с соответствующим значением прицельного параметра b.

2. Найти скорость электрона на второй боровской орбите для атома водорода. Чему равна энергия связи электрона на второй боровской орбите?

3. В спектре некоторых водородоподобных ионов известны длины волн трех линий, принадлежащих одной и той же серии: 99.2, 108.5 и 121.5 нм. Какие спектральные линии можно предсказать с помощью этих линий ?

4. Покоившийся атом водорода испустил фотон, соответствующий головной линии серии Лаймана. Найти скорость отдачи, которую получил атом.

5. Энергия связи электрона в атоме гелия равна $\mathcal{E} = 24.6$ эВ. Найти энергию, необходимую для удаления обоих электронов из этого атома.

6. Чему равны радиус первой боровской орбиты и скорость электрона на ней в водородоподобном атоме? Вычислите эти величины для первой боровской орбиты атома водорода, ионов He^+, Li^{++}.

7. Найти для атома позитрония (связанное состояние электрона и позитрона) расстояние между частицами в основном состоянии, ионизационный потенциал, первый потенциал возбуждения, постоянную Ридберга и длину волны резонансной линии (резонансная линия - линия, обусловленная переходом атомов из первого возбужденного состояния в основное).

8. Частица массы m движется по круговой орбите в центральном поле $U(r) = \kappa r^2/2$. Найти в рамках квантовой теории Бора-Зоммерфельда разрешенные радиусы орбит и уровни энергии частицы.

9. Эффективное сечение ядра атома золота, соответствующее рассеянию моноэнергетических альфа-частиц в интервале углов $90^o \div 180^o$, равно $\Delta\sigma = 0.50 \cdot 10^{-25}$ м^2. Определить кинетическую энергию альфа-частиц.

10. Узкий пучок $\alpha-$частиц с кинетической энергией $T_\alpha = 1.0$ МэВ падает нормально на золотую фольгу толщиной $d = 1$ мкм. Поток частиц $I = 3.6 \cdot 10^4$ сек$^{-1}$. Найти число $\alpha-$частиц, рассеянных фольгой в течение $t = 2.0$ мин под углами превышающими $\theta_0 = 60^o$.

11. Атомарный водород возбуждают на $n-$ый энергетический уровень. Определить сколько линий испускает водород, если $n = 10$.

12. Вычислить скорость электронов, вырываемых электромагнитным излучением с длиной волны $\lambda = 18.0$ нм из ионов гелия He^+, находящихся в основном состоянии.

13. С какой минимальной скоростью должны сближаться ион He^+ и атом водорода, чтобы испущенный ионом гелия фотон, соответствующий головной линии серии Бальмера, смог возбудить атом водорода из основного состояния ? Использовать точную формулу доплеровского эффекта.

14. Найти для атома мюония (связанное состояние электрона и положительного мюона) расстояние между частицами в основном состоянии, ионизационный потенциал, первый потенциал возбуждения, постоянную Ридберга и длину волны резонансной линии (резонансная линия - линия, обусловленная переходом атомов из первого возбужденного состояния в основное).

15. Найти с помощью постулата Бора-Зоммерфельда разрешенные значения энергии E частицы массы m, которая движется в одномерном потенциальном поле $U(x) = kx^2/2$, где $k > 0$.

16. Найдите энергию связи электрона в основном состоянии водородоподобных ионов, в спектре которых длина волны, соответствующая третьей линии серии Бальмера, равна 108.5 нм.

17. Рассмотреть задачу о квантовании уровней энергии атома водорода, считая, что движение электрона является релятивистским. Для этого представить полную энергию электрона в виде:

$$E = mc^2\left(\frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} - 1\right) - \frac{Ze^2}{r}, \quad \beta = \frac{v}{c}. \tag{80}$$

Ввести два обобщенных импульса: $p_\phi = mr^2\dot{\phi}$, $p_r = m\dot{r}$, $\beta^2 = \frac{v^2}{c^2} = \frac{1}{m^2c^2}\left(p_r^2 + \frac{1}{r^2}p_\phi^2\right)$ и выразить энергию электрона через эти обобщенные импульсы. Доказать, что уравнение траектории имеет вид:

$$\rho = \frac{1}{r} = C + A\cos\gamma\phi, \ \gamma^2 = 1 - \frac{(Ze^2)^2}{p_\phi^2 c^2}, \ C = \frac{mZe^2}{\gamma^2 p_\phi^2}\left(1 + \frac{E}{mc^2}\right). \tag{81}$$

Записать два условия квантования Бора-Зоммерфельда:

$$\oint p_\varphi d\phi = p_\varphi \cdot 2\pi = n_\phi h, \quad \oint p_r dr = p_\phi\gamma\left(-2\pi + \frac{2\pi C}{\sqrt{C^2 - A^2}}\right) = n_r h, \tag{82}$$

где постоянная A определяется из условия:

$$\frac{p_\varphi^2\gamma^2}{m^2c^2}A^2 = \left(1 + \frac{W + CZe^2}{mc^2}\right)^2 - 1 - \frac{p_\phi^2}{m^2c^2}C^2. \tag{83}$$

Разрешая условия квантования относительно энергии электрона, получить формулу тонкой структуры спектра энергии:

$$E_{n_r n_\phi} = mc^2\left\{\left[1 + \frac{(Z\alpha)^2}{(n_r + \sqrt{n_\phi^2 - Z^2\alpha^2})}\right]^{-\frac{1}{2}} - 1\right\}. \tag{84}$$

Получить приближенную формулу тонкой структуры спектра, вводя $n = n_r + n_\phi$, $k = n_\phi$:

$$E_{nk} = mc^2\left\{-\frac{1}{2}\frac{(Z\alpha)^2}{n^2} - \frac{1}{2}\frac{(Z\alpha)^4}{n^4}\left(\frac{n}{k} - \frac{3}{4}\right)\right\}. \tag{85}$$

- **Бор**, Нильс Хендрик Давид (07.10.1885-18.11.1962), выдающийся датский физик-теоретик, один из создателей современной квантовой физики. Сформулировал идею о дискретности энергетических состояний атомов, построил атомную модель, создал теорию водородоподобных атомов (Нобелевская премия 1922 г.). Сформулировал принцип соответствия. Создатель системы физических идей квантовой механики. Создатель капельной модели ядра.

- **Резерфорд**, Эрнест (30.08.1871-19.10.1937), английский физик, основоположник ядерной физики. Исследования посвящены радиоактивности, атомной и ядерной физике. Открыл альфа- и бета-лучи, ввел понятие периода полураспада. Разработал теорию радиоактивного распада. Предсказал существование трансурановых элементов (Нобелевская премия по химии 1908 г.). Сконструировал прибор для регистрации отдельных заряженных частиц. Создал планетарную модель атома. Выдвинул идею об искусственном превращении атомных ядер. Предсказал существование нейтрона и дейтрона. Осуществил реакцию синтеза дейтронов с образованием трития.

- **Ритц**, Вальтер (22.02.1878-07.07.1909), швейцарский физик-теоретик и математик. Работы посвящены спектроскопии, теории теплового излучения, электродинамике. Сформулировал комбинационный принцип в спектроскопии. Сформулировал метод решения вариационных задач.

- **Зоммерфельд**, Арнольд Иоганнес Вильгельм (05.11.1868-26.04.1951), немецкий физик-теоретик. Работы посвящены исследованию рентгеновских лучей, спектроскопии. Вывел формулу тонкой структуры спектра энергии атома. Автор учебников по различным разделам теоретической физики.

- **Ридберг**, Йоханнес Роберт (08.11.1854-28.12.1919), шведский физик. Занимался изучением периодической системы элементов и атомных спектров. Ридбергом было показано, что расположение линий в атомных эмиссионных спектрах может быть описано формулами, аналогичными формуле Бальмера для спектра водорода. Постоянная, используемая в этих формулах, названа его именем.

4. ВОЛНЫ ДЕ БРОЙЛЯ. СООТНОШЕНИЕ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТЕЙ ГЕЙЗЕНБЕРГА

4.1. Волны де Бройля. Соотношение неопределенностей Гейзенберга. Краткая теория

«Shut up and calculate»

В 1923 году французский физик Луи де Бройль предложил связывать со всякой свободно движущейся частицей с энергией E и импульсом $\mathbf{p}$ плоскую волну. Рассуждения де Бройля были очень просты и крайне революционны одновременно. Свет представляет собой электромагнитную волну, но в ряде случаев ведет себя как поток частиц - квантов с определенной энергией и импульсом. Квант света отличается от других частиц, например от электронов, лишь тем, что его масса равна нулю. Вряд ли такое различие можно считать принципиальным. *Почему же электрону, который частица, да и вообще любой частице, не быть также волной.* Плоская волна де Бройля для свободно движущейся частицы может быть записана в виде:

$$\psi(\mathbf{r},t) = C \cdot e^{i(\mathbf{kr}-\omega t)} = C \cdot e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{pr}-Et)}. \tag{86}$$

Частота волны ω и волновой вектор $\mathbf{k}$ связаны с энергией частицы E и импульсом $\mathbf{p}$ такими же соотношениями, что и для квантов света:

$$E = \hbar\omega, \quad \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}, \quad \lambda = \frac{h}{p}. \tag{87}$$

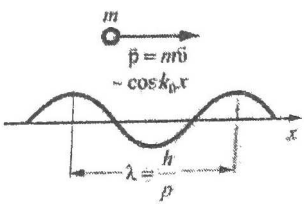

Рис. 13. Иллюстрация гипотезы де Бройля.

Для света мы имели первоначально волновую картину и затем дополнили ее корпускулярной теорией. Для частиц в качестве исходных мы имеем корпускулярные представления, которые предлагается дополнить волновыми представлениями, вводя (48). *«Он поднял угол великого занавеса»*

эти слова были сказаны А. Эйнштейном после прочтения диссертации де Бройля. Соотношения де Бройля как бы *узаконивают* корпускулярно-волновой дуализм. Н. Бор называл попытку объединения волновой и корпускулярной точек зрения иррациональной. Действительно, E, $\mathbf{p}$ относятся к частице, имеющей пренебрежимо малые размеры. Напротив, ω, $\mathbf{k}$ характеризуют бесконечно протяженную волну. Трудно представить, как можно объединить эти две концепции.

Волна де Бройля распространяется в пространстве с определенной скоростью - фазовой скоростью u. Чтобы ее найти, рассмотрим поверхность постоянной фазы:

$$\phi = k \cdot x - \omega t = const. \tag{88}$$

Тогда

$$u = \frac{dx}{dt} = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{p} = \frac{\sqrt{p^2c^2 + m^2c^4}}{p} \tag{89}$$

Для релятивистской частицы импульс связан с энергией и скоростью следующим соотношением:

$$\mathbf{p} = \frac{E}{c^2}\mathbf{v}. \tag{90}$$

Тогда фазовая скорость равна $u = \frac{c^2}{v}$. Она оказывается больше скорости света. Этот результат говорит о том, что фазовая скорость не может соответствовать движению частицы или переносу какой-либо энергии. Таким образом, попытка связать с частицей плоскую монохроматическую волну оказывается неудачной. Поскольку частица локализована в пространстве, то можно попытаться связать с ней группу волн или волновой пакет:

$$\psi(x,t) = \int_{k_0-\Delta k}^{k_0+\Delta k} C(k) e^{i(kx-\omega t)}. \tag{91}$$

где $k_0 = 2\pi/\lambda_0$ — волновое число, около которого лежат волновые числа волн, образующих группу. Разложим частоту ω, как функцию k, по степеням $(k - k_0)$:

$$\omega = \omega_0 + \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0 (k - k_0) + ...; \quad k = k_0 + (k - k_0). \tag{92}$$

Считая, что $C(k)$ медленно меняющаяся функция k, выполним интегрирование по k:

$$\psi(x,t) = C(k_0) e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \int_{-\Delta k}^{\Delta k} e^{i(\xi x - \xi \left(\frac{d\omega}{dt}\right)_0 t)} d\xi = \tag{93}$$

$$= 2C(k_0)e^{i(k_0x-\omega_0t)}\frac{\sin\Delta k(x-\left(\frac{d\omega}{dt}\right)_0 t)}{x-\left(\frac{d\omega}{dt}\right)_0 t} = C(x,t)e^{i(k_0x-\omega_0t)},$$

где $C(x,t)$ можно рассматривать как амплитуду почти монохроматической волны, а $(k_0x-\omega_0t)$ как фазу волны. Амплитуда $C(x,t)$ имеет максимум в точке с координатой $x=\left(\frac{d\omega}{dt}\right)_0 t$. Следовательно, центр группы волн перемещается со скоростью

$$v_{\text{гр}} = \frac{dx}{dt} = \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0 = \left(\frac{dE}{dp}\right)_0, \tag{94}$$

которую называют групповой. Вычислим эту скорость для волн де Бройля:

$$v_{\text{гр}} = \left(\frac{dE}{dp}\right)_0 = \frac{d}{dp}\sqrt{p^2c^2+m^2c^4} = \frac{pc^2}{E} = v_{\text{част}}. \tag{95}$$

Таким образом, групповая скорость волнового пакета совпадает со скоростью релятивистской частицы. В результате открывается возможность интерпретировать материальную частицу, как волновой пакет. Однако, такая интерпретация наталкивается на другую проблему, связанную с расплыванием волнового пакета с течением времени. Действительно, если частица нерелятивистская, то

$$\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{p^2}{2m\hbar} = \frac{\hbar k^2}{2m}. \tag{96}$$

В результате фазовая скорость одной составляющей волнового пакета с волновым числом k равна:

$$u = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2m}, \tag{97}$$

то есть зависит от k. Поэтому, отдельные волны де Бройля, составляющие волновой пакет, будут распространяться с разными фазовыми скоростями, и волновой пакет будет расплываться. Найдем зависимость ширины волнового пакета от времени. Для этого выберем в начальный момент времени следующий вид пакета:

$$\psi(x,0) = e^{-\frac{x^2}{4\Gamma^2}},\ \rho(x,0) = |\psi(x,0)|^2 = e^{-\frac{x^2}{\Gamma^2}}. \tag{98}$$

Такая форма ясно показывает локализацию пакета в области $x=0$ в начальный момент времени. Для определения формы пакета в последующие

моменты времени вычислим амплитуды $A(k)$, составляющие пакет в начальный момент времени:

$$\psi(x,0) = e^{-\frac{x^2}{2\Gamma^2}} = \int_{-\infty}^{\infty} A(k)e^{ikx}dk, \tag{99}$$

$$A(k) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x,0)e^{-ikx}dx = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{x^2}{2\Gamma^2}}e^{-ikx}dx = \frac{\Gamma}{\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{k^2\Gamma^2}{2}}. \tag{100}$$

Теперь можно найти форму волнового пакета в произвольный момент времени, выполнив интегрирование в следующем выражении:

$$\psi(x,t) = \frac{\Gamma}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{k^2\Gamma^2}{2}}e^{i(kx-\frac{\hbar k^2}{2m}t)}dk = \frac{\Gamma}{\sqrt{\Gamma^2+\frac{i\hbar t}{m}}}e^{-\frac{x^2}{2(\Gamma^2+\frac{i\hbar t}{m})}}. \tag{101}$$

$$\rho(x,t) = |\psi(x,t)|^2 = \frac{\Gamma}{\sqrt{\Gamma^2+\left(\frac{\hbar t}{m\Gamma}\right)^2}}e^{-\frac{x^2}{\Gamma(t)^2}}, \Gamma(t) = \sqrt{\Gamma^2+\left(\frac{\hbar t}{m\Gamma}\right)^2} \tag{102}$$

Ширина пакета зависит от времени, с течением времени пакет расплывается.

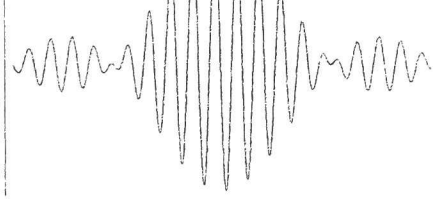

Рис. 14. Вид волнового пакета в фиксированный момент времени.

Восприняв идеи де Бройля, Э. Шредингер опубликовал в 1926 году серию работ, в которых он поставил задачу получить волновое уравнение, которому должна удовлетворять волна де Бройля. Отправным пунктом при выводе такого уравнения может служить волновое уравнение, которому должна удовлетворять любая волна:

$$\nabla^2\psi(\mathbf{r},t) - \frac{1}{u^2}\frac{\partial^2\psi(\mathbf{r},t)}{\partial t^2} = 0. \tag{103}$$

где $u = E/p$ - фазовая скорость волны де Бройля. Пусть с этой волной связана частица, которую мы считаем нерелятивистской и движущейся в потенциальном поле:

$$E = \frac{p^2}{2m} + U(r), \quad p = \sqrt{2m(E - U(r))}. \tag{104}$$

Перепишем волновое уравнение с учетом фазовой скорости, следующей из последнего соотношения:

$$\nabla^2\psi(\mathbf{r},t) - \frac{2m(E-U(r))}{E^2}\frac{\partial^2\psi(\mathbf{r},t)}{\partial t^2} = 0. \tag{105}$$

Поскольку мы рассматриваем волну де Бройля определенной частоты (энергии), зависимость волновой функции от времени имеет вид:

$$\psi(\mathbf{r},t) = \psi(\mathbf{r})e^{-i\omega t} = \psi(\mathbf{r})e^{-\frac{i}{\hbar}Et}. \tag{106}$$

Подставляя ее в волновое уравнение, получим стационарное уравнение Шредингера:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(r)\right]\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}). \tag{107}$$

Общепринятая в настоящее время интерпретация волновой функции была развита в работах М. Борна, Н. Бора и В. Гейзенберга. Весь ход событий в физической системе определяется вероятностными законами. Тому или иному положению частицы в пространстве соответствует некоторая вероятность, определяемая связанной с частицей волной де Бройля. Таким образом, механический процесс сопряжен с волновым процессом - процессом распространения вероятностной волны. Последняя подчиняется уравнению Шредингера, значение которого состоит в том, что оно определяет вероятность любого хода событий в механическом процессе. Такая вероятностная интерпретация связана с опытами К. Девиссона и Л. Джермера по дифракции электронов. В экспериментах Девиссона-Джермера (см. рис. 15) параллельный пучок электронов направлялся из источника S на кристалл. Отраженные электроны улавливались коллектором D, который мог быть установлен под любым углом β. Измеряя силу тока коллектора при разных положениях можно было судить об интенсивности отраженного пучка. В результате в зависимости интенсивности появлялись характерные интерференционные максимумы и минимумы. В этом случае $\rho = |\psi(\mathbf{r})|^2$ дает вероятность обнаружить электрон на экране в некоторой точке. Интенсивность волн де Бройля в каком-либо месте пространства пропорциональна вероятности обнаружить частицу в этом месте.

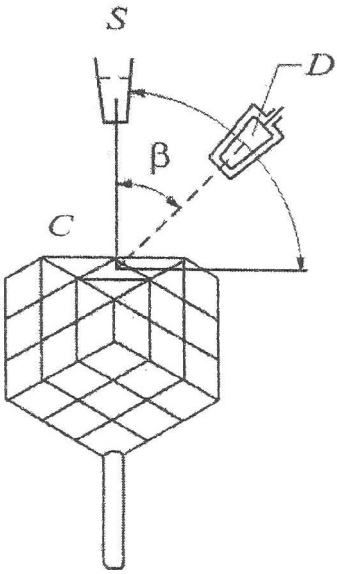

Рис. 15. Дифракция электронов на кристаллах в эксперименте Девиссона-Джермера.

Другой дифракционный эксперимент с пучком электронов, испускаемых источником, показан на рис.16 (дифракция электронов на двух щелях). Детектором, регистрирующим электрона, является либо электрическая система, либо фотопластинка. Электроны попадают в детектор (на экран) по-одному, дискретно. В резудьтате, когда открыты обе щели, мы получим дифракционную картину А. Попытаемся проанализировать эту кривую. Предположим, что наши электроны попадают в детектор либо через щель 1, либо через щель 2. Закроем одну из щелей и измерим кривую интенсивности. В результате мы получим либо кривую 1' (закрыта 2 щель), либо кривую 2' (закрыта 1 щель). Но если открыть обе щели, мы не получим простой суммы двух кривых 1' и 2'. Таким образом, наше предположение, что электрон попадает в детектор через одно из отверстий неверно. Следует признать, что каждый электрон попадает в детектор, проходя сразу через два отверстия.

Впервые в физике существенным элементом теории были не только математические уравнения, но и интерпретация этих уравнений и входящих в них понятий. Стандартное описание квантовой механики, которое полу-

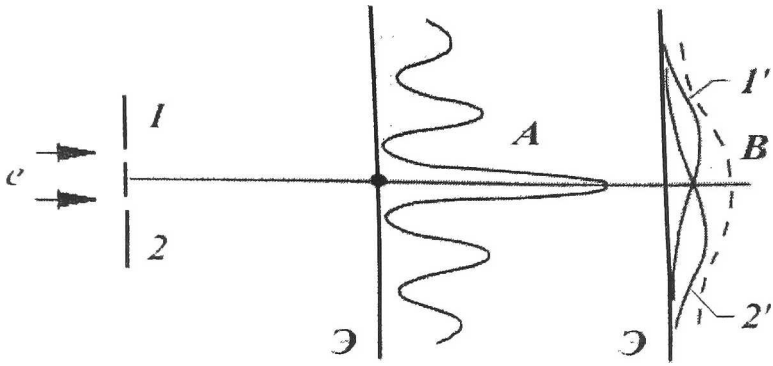

Рис. 16. Дифракция электронов на двух щелях.

чило название *копенгагенской интерпретации* состоит в следующем:

1. Состояние квантовой системы описывается волновой функцией, которая имеет вероятностную интерпретацию. Вероятностный характер предсказаний квантовой механики принципиально неустраним.

2. Эволюция системы во времени определяется уравнением Шредингера.

3. Результат измерения предсказывается вероятностным образом, и состояние системы при измерении скачком переходит в новое состояние, соответствующее результату измерения (постулат редукции). В этой связи говорят о коллапсе, схлопывании волновой функции в момент измерения. Процесс измерения случайно выбирает одну из возможностей, допустимых волновой функцией данного состояния, а волновая функция мгновенно изменяется, чтобы отразить этот выбор. Копенгагенская интерпретация отбрасывает вопросы типа «где была частица до того, как я зарегистрировал ее местоположение» как бессмысленные. В результате редукции волнового пакета происходит сведение всех его возможностей к одному показанию стрелки макроприбора. Все другие возможности в списке , которые составляют волновую функцию не реализуются в этом взаимодействии микрообъекта с макрообъектом.

Коллапс волн вероятности при измерении является ключевым моментом в копенгагенской интерпретации квантовой теории. Однако из анализа уравнения Шредингера следует, что схлопывание волны во всех точках кроме одной не может быть по всей видимости описано уравнением Шредингера. При наблюдении, говорит нам копенгагенская интерпрета-

ция, уравнение Шредингера следует отодвинуть в сторону и объявить, что наблюдение заставило волну схлопнуться. В стремлениях вывести постулат редукции из уравнений квантовой теории делались даже безуспешные попытки модифицировать нелинейным образом уравнение Шредингера.

В 1954 г. никому неизвестный студент Принстонского университета Хью Эверетт придумал поразительную интерпретацию квантовой механики (см. рис.14). Он показал, что для правильной интерпретации квантовой механики может потребоваться огромное количество параллельных вселенных. Теория Эверетта была названа позже многомировой интерпретацией (название принадлежит Б. де Витту). Интерпретация Эверетта базируется на предположении, что уравнение Шредингера выполняется и для сложноустроенных тел. Оно должно оставаться справедливым и при измерении. Уравнение Шредингера не позволяет волнам схлопнуться. Тогда возникает вопрос: «Что происходит с волной вероятности при измерении, что позволяет проявиться единственной реальности?» Х. Эверетт утверждает, что при проведении измерения все альтернативные варианты исхода уже реально сосуществуют в некоторой большой квантовой суперпозиции альтернативных вселенных. Эта большая суперпозиция описывается волновой функцией ψ для всей Вселенной в целом. Вектор состояния ψ представляет собой более глубокий уровень реальности, не наблюдаемой непосредственно. Состояния разума экспериментатора также сосуществуют в этой квантовой суперпозиции. При этом различные отдельные состояния разума перепутаны с различными возможными результатами проводимого измерения. В соответствии с этим эффективно существует свой мир для каждого из возможных результатов измерения. В каждом из этих миров имеется своя копия экспериментатора, и все эти миры сосуществуют в виде квантовой суперпозиции. Каждая копия экспериментатора получает свой результат эксперимента (то есть редукция состояния отсутствует), но поскольку эти копии обитают в разных мирах, между которыми нет связи, каждая из них полагает, что существует лишь один результат. Подход Эверетта перекидывает мостик между позицией Эйнштейна, который считал, что фундаментальная физическая теория не должна содержать вероятности, и позицией Бора, который был совершенно удовлетворен созданной квантовой механикой.

В копенгагенской интерпретации квантовая теория несправедлива в момент измерения. При проведении любого измерения состояние мира мгновенно прекращает подчиняться детерминистическим законам эволюции со-

стоянии квантовой теории, внезапно переходя в одно из собственных состояний измеряемой величины. Собственное состояние, в которое происходит переход выбирается случайно. Именно с этой чертой квантовой механики не мог согласиться А. Эйнштейн. В многомировой интерпретации явление продолжает развиваться согласно уравнению Шредингера и во время взаимодействия и после него, но различные значения наблюдаемой оказываются в различных вселенных. Но эти вселенные из данной вселенной не наблюдаются.

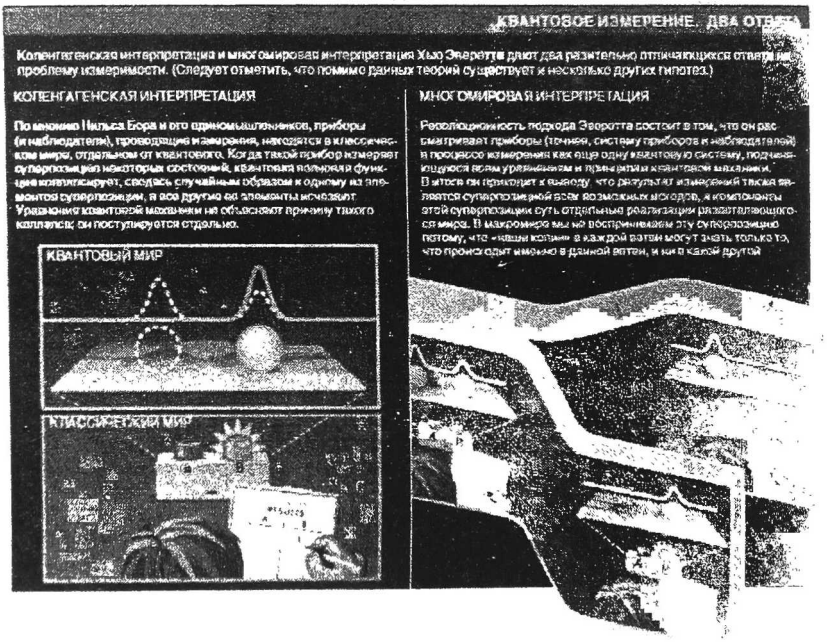

Рис. 17. К многомировой интерпретации Х. Эверетта.

4.2. Примеры решения задач

Задача 1. *Узкий пучок моноэнергетических электронов падает под углом скольжения $\theta = 30^0$ на естественную грань монокристалла алюминия. Расстояние между соседними кристаллическими плоскостями*

параллельными этой грани монокристалла, $d = 2.0$ ангстрема. При некотором ускоряющем напряжении V_0 наблюдали максимум зеркального отражения. Найти V_0, если известно, что следующий максимум зеркального отражения возникал при увеличении ускоряющего напряжения в n=2.25 раза.

Решение:

Согласно гипотезе де Бройля электронный пучок обладает волновыми свойствами и испытывает дифракционное отражение от кристаллической решетки. Угловое положение максимума дифракционного отражения определяется условием Вульфа-Брегга: $2d\sin\theta = m\lambda$, где m- целое число, λ-длина волны де Бройля. Ее можно найти, воспользовавшись соотношениями де Бройля и выражением для энергии электрона:

$$p = \hbar k; \quad E = \hbar\omega; \quad k = \frac{2\pi}{\lambda}; \quad E = \frac{p^2}{2m}. \tag{108}$$

Откуда $\lambda = 2\pi\hbar/(2meV_0)^{1/2}$, здесь учтено, что электрон получает энергию за счет ускорения в электрическом поле напряжения V_0 ($E = eV_0$, где e-заряд электрона). Запишем условие Вульфа-Брегга для двух случаев, описанных в условии задачи (k - порядок интерференции):

$$d\sin\theta = \frac{k\pi\hbar}{(2meV_0)^{1/2}}; \quad d\sin\theta = \frac{(k+1)\pi\hbar}{(2mneV_0)^{1/2}}.$$

После преобразований находим:

$$V_0 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2med^2(n^{1/2}-1)^2\sin^2\theta} = 0.15 \text{ кэВ}.$$

Задача 2. *Исходя из соотношения неопределенностей, оценить энергию связи электрона в основном состоянии атома водорода и соответствующее расстояние электрона. от ядра.*

Решение:

Соотношение неопределенностей Гейзенберга означает, что произведение неопределенностей координаты и импульса электрона удовлетворяет (приблизительно) следующему неравенству:

$$\Delta q \cdot \Delta p \geq \hbar. \tag{109}$$

В атоме водорода мы не знаем точно значения координаты r и импульса p электрона. Можно говорить, что неопределенность координаты порядка самой координаты электрона в атоме: $\Delta r \sim r$, а неопределенность импульса электрона порядка значения самого импульса: $\Delta p \sim p$. Тогда соотношение неопределенностей Гейзенберга (109) примет вид:

$$\Delta r \cdot \Delta p \sim r \cdot p \geq \hbar.$$

Для оценки энергии связи электрона в основном состоянии запишем его энергию в виде:

$$E = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r} \geq \frac{\hbar^2}{2mr^2} - \frac{e^2}{r}.$$

Найдем минимальное значение энергии, для чего запишем условие минимума в виде:

$$\frac{dE}{dr} = 0, -\frac{\hbar^2}{mr^3} + \frac{e^2}{r^2} = 0, \quad r_{min} = \frac{\hbar^2}{me^2} = 0,5 \cdot 10^{-8} \text{ см}$$

Тогда $E_{min} = -\frac{me^4}{2\hbar^2} = 13.6$ эВ, что совпадает с точным значением энергии в теории Бора.

Задача 3. *При каком значении кинетической энергии дебройлевская длина волны электрона равна его комптоновской длине волны?*

Решение:

Комптоновская и дебройлевская длины волн электрона определяются следующими формулами:

$$\lambda_C = \frac{h}{m_e c}, \quad \lambda_B = \frac{h}{p} \tag{110}$$

Из равенства этих длин волн следует, что импульс электрона $p = m \cdot c$. Чтобы найти кинетическую энергию электрона воспользуемся релятивистской формулой:

$$T = \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4} - mc^2 = \sqrt{2}mc^2 - mc^2 = (\sqrt{2} - 1)mc^2 = 0.21 \text{ МэВ}.$$

Задача 4. *Найти дебройлевскую длину волны молекулы водорода, если она движется со скоростью равной наиболее вероятной скорости при комнатной температуре.*

Решение:

В соответствии с гипотезой де Бройля молекула водорода представляет собой волну с длиной волны

$$\lambda_H = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv},$$

где p - импульс молекулы, а v ее скорость. Наболее вероятную скорость молекулы водорода можно найти, используя распределение Максвелла по скоростям:

$$dN = 4\pi N \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} v^2 e^{-\frac{E}{kT}} dv.$$

Она равна $v_{\text{вер}} = \sqrt{2kT/m}$. Таким образом, наиболее вероятный импульс оказывается равным $p_{\text{вер}} = \sqrt{2mkT}$, а длина волны де Бройля молекулы водорода имеет вид:

$$\lambda_H = \frac{h}{\sqrt{2mkT}}.$$

Ее численное значение $\lambda_H = 0.127$ нм, находим после подстановки всех констант в это выражение.

4.3. Задачи для самостоятельного решения

1. Определить кинетическую энергию электронов, падающих на диафрагму с двумя узкими щелями, если известно, что на экране, отстоящем от диафрагмы на расстоянии l=75 см, расстояния между соседними максимумами Δx и между щелями d равны соответственно 7.5 и 25 мкм.

2. Пучок электронов с кинетической энергией T 10 кэВ проходит через тонкую поликристаллическую фольгу и образует систему дифракционных колец на экране, отстоящем от фольги на l 10.0 см. Найти межплоскостное расстояние, для которого максимум отражения третьего порядка соответствует кольцу с радиусом r =1.6 см.

3. Показать, что измерение x-координаты частицы с помощью узкой щели шириной b вносит неопределенность в их импульсы Δp_x, такую, что $\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar$.

4. Оценить неопределенность скорости электрона в атоме водорода, полагая размер атома порядка 10^{-8} см. Сравнить полученную величину со скоростью электрона на первой боровской орбите.

5. Частица с массой m движется в одномерном потенциальном поле $U(x) = kx^2/2$ (гармонический осциллятор с частотой $\omega = (k/m)^{1/2}$). Оценить минимально возможную энергию частицы.

6. Свободный электрон в начальный момент был локализован в области размером $l = 10^{-8}$ см. Оценить промежуток времени, за который ширина соответствующего волнового пакета увеличится в $n = 10^2$ раз.

7. Частица с массой m движется в прямоугольной потенциальной яме с бесконечными стенками. Ширина ямы l. Найти значения энергии частицы, имея в виду, что возможны лишь такие состояния, для которых в яме укладывается целое число дебройлевских полуволн (образуется система стоячих волн).

8. Найти с помощью распределения Максвелла функцию распределения молекул по дебройлевским длинам волн, а также наиболее вероятную длину волны молекул водорода при $T = 300^0$ К.

9. Пучок электронов с кинетической энергией T=180 эВ падает нормально на поверхность монокристалла никеля. В направлении составляющем угол $\alpha = 55^0$ с нормалью к поверхности, наблюдается максимум отражения четвертого порядка. Найти межплоскостное расстояние, соответствующее этому отражению.

10. С учетом преломления элктронных волн в кристалле формула Вульфа-Бреггов имеет вид: $2d(n^2 - cos^2\theta)^{1/2} = k\lambda$, где d-межплоскостное расстояние, n–показатель преломления, θ- угол скольжения, k- порядок отражения, λ-длина волны де Бройля.
a) Вывести эту формулу, считая, что отражающие плоскости параллельны поверхности монокристалла.
b) Найти внутренний потенциал монокристалла серебра, если пучок электронов, ускоренных разностью потенциалов V=85 эВ, образует максимум второго порядка при зеркальном отражении от кристаллических плоскостей с $d = 2.04$ ангстрем под углом скольжения $\theta = 30^0$.

11. Оценить наименьшие ошибки, с которыми можно определить скорости электрона, протона и атома урана, локализованных в области размером 1 мкм.

12. Частица находится в одномерном потенциальном ящике размером l с бесконечно высокими стенками. Оценить силу давления частицы на стенки при минимально возможном значении энергии E_{min}.

13. Параллельный пучок атомов водорода со скоростью $v = 1.2 \cdot 10^3$ м/с падает нормально на диафрагму с узкой щелью, за которой на расстоянии l=1.0 м расположен экран. Исходя из соотношения неопределенностей оценить ширину щели, при которой эффективная ширина изображения на экране будет минимальной.

14. Свободно движущаяся нерелятивистская частица имеет относительную неопределенность кинетической энергии порядка $1.6 \cdot 10^{-4}$. Оценить , во сколько раз неопределенность координаты частицы больше ее дебройлевской длины волны.

15. Какова длина волны де Бройля протона и электрона, у которых энергия равна средней кинетической энергии теплового движения молекул при комнатной температуре? (средняя кинетическая энергия теплового движения молекул при комнатной температуре равна $3kT/2$).

16. Убедитесь, что при измерении координаты x частицы с помощью микроскопа неопределенность проекции ее импульса p_x такова, что $\Delta x \Delta p_x \geq \hbar$. Учесть, что разрешение микроскопа $d = \lambda / \sin\theta$, где λ длина волны используемого света.

17. Интерпретировать квантовые условия Бора на основе волновых представлений: показать, что электрон в атоме водорода может двигаться только по тем круговым орбитам, на которых укладывается целое число дебройлевских волн (см. рис.15).

4.4. Биографическое примечание

- **Бройль**, Луи Виктор Пьер Раймон (15.08.1892-19.03.1987), выдающийся французский физик-теоретик. Один из основоположников квантовой механики. Автор работ по фундаментальным проблемам квантовой теории. Ему принадлежит гипотеза о волновых свойствах

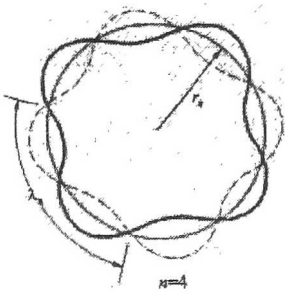

Рис. 18. Интерпретация квантовых условий Бора-Зоммерфельда.

материальных частиц (Нобелевская премия 1929 г.). Он предложил оригинальную интерпретацию квантовой механики (теория волны-пилота, теория двойного решения), развивал релятивистскую теорию частиц с произвольным спином, занимался вопросами радиофизики, классической и квантовой теориями поля, термодинамики и других разделов физики.

- **Шредингер**, Эрвин (12.08.1887-04.01.1961), выдающийся австрийский физик-теоретик, один из создателей квантовой механики. Работы посвящены статистической физике, квантовой механике, общей теории относительности, биофизике. Разработал волновую механику (Нобелевская премия 1932 г.). Доказал эквивалентность волновой и матричной механики. Построил квантовую теорию возмущений.

- **Девиссон**, Клинтон Джозеф (22.10.1881-01.02.1958), американский физик-экспериментатор. Работы относятся к термоэлектронной эмиссии, тепловому излучению, физике кристаллов, квантовой теории. Открыл явление дифракции электронов (Нобелевская премия 1937 г.). Развил метод электронной фокусировки.

- **Эверетт**, Хью (11.11.1930-19.07.1982), американский математик, физик-теоретик, занимался вопросами интерпретации квантовой механики. Создал новую интерпретацию квантовой механики, согласно которой квантовые эффекты порождают бесчисленное множество альтернативных вселенных, события в которых происходят по-разному.

5. МАТРИЧНАЯ МЕХАНИКА ГЕЙЗЕНБЕРГА. ОПЕРАТОРЫ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ. СООТНОШЕНИЕ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТЕЙ ГЕЙЗЕНБЕРГА

5.1. Матричная механика Гейзенберга. Операторы в квантовой механике. Краткая теория

29 июля 1925 г. в редакцию журнала *Zeitschrift fur Physik* поступила статья 24-летнего немецкого физика Вернера Гейзенберга «О квантовотеоретической интерпретации кинематических и механических соотношений». В этой статье В. Гейзенберг заложил основы матричной механики, призванной заменить атомную механику Н. Бора. Этот день считается днем рождения квантовой механики.

С точки зрения В. Гейзенберга теория Бора несостоятельна, потому что фундаментальные идеи, на которые она опирается (картина орбит, справедливость классических законов и т.д.) никогда не могут быть проверены на опыте. Идея В. Гейзенберга состояла в том, что надо разделить то, что можно наблюдать, и то, что наблюдать нельзя. Заметим, что более чем за год до этого В. Паули выразил сомнение в пользу введения орбит электронов в письме Н. Бору (февраль 1924 г.). Изучая атомные системы В. Гейзенберг предлагает работать лишь с *наблюдаемыми величинами*, каковыми являлись частоты излучения ω_{nm}, амплитуды излучения a_{nm} (a_{nm} это амплитуда излучения при переходе атома из состояния n в состояние m), интенсивности излучения I_{nm}. Таким образом, экспериментальный анализ излучения и поглощения электромагнитного поля атомами «снабжает» физиков набором $\{\omega_{nm}, a_{nm}\}$. Поскольку частоты излучения атома нумеруются парами чисел, то парами целых чисел должны перечисляться и все динамические переменные, связанные с атомом: координата, импульс, ...). Таким образом, В. Гейзенберг вводит для описания атома таблицы:

$$\omega_{nm} = \begin{pmatrix} \omega_{11} & \omega_{12} & \omega_{13} & \dots \\ \omega_{21} & \omega_{22} & \omega_{23} & \dots \\ \omega_{31} & \omega_{32} & \omega_{33} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}, \quad a_{nm} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \dots \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}, \qquad (111)$$

a_{nm} - это амплитуды осциллятора (излучения) с частотой ω_{nm}. Назовем эти таблицы схемами частот и амплитуд Гейзенберга. Эквивалентную этим двум схемам схему элементов $a_{nm}e^{i\omega_{nm}t}$ назовем схемой элементов Гейзенберга. Все физические величины A, B, C начинают определяться в подходе

Гейзенберга своими таблицами частот и амплитуд:

$$A \leftrightarrow \{A_{nm}, \omega_{nm}\}, \quad B \leftrightarrow \{B_{nm}, \omega_{nm}\}, \quad C \leftrightarrow \{C_{nm}, \omega_{nm}\}. \tag{112}$$

Как обращаться с такими схемами элементов Гейзенберга при вычислениях? Ряд операций с ними определяется достаточно просто. Например, умножение схемы элементов Гейзенберга на число дает другую схему элементов: $\{\omega_{nm}, C \cdot A_{nm}\}$. Сложение двух схем элементов $\{\omega_{nm}, A_{nm}\}$ и $\{\omega_{nm}, B_{nm}\}$ даст вновь схему элементов Гейзенберга: $\{\omega_{nm}, (A+B)_{nm}\}$. Как теперь определить произведение двух схем элементов Гейзенберга, чтобы это произведение вновь было схемой элементов Гейзенберга:

$$\{A_{nk}e^{i\omega_{nk}t}\} \times \{B_{lm}e^{i\omega_{lm}t}\} \leftrightarrow \{C_{nm}e^{i\omega_{nm}t}\}. \tag{113}$$

Для построения искомого закона умножения заметим, что если два индекса у перемножаемых элементов совпадают, то это приводит к требуемому результату. Перемножим вначале экспоненциальные факторы:

$$e^{i\omega_{nk}t}e^{i\omega_{km}t} = e^{i(\omega_{nk}+\omega_{km})t} = e^{i\omega_{nm}t}. \tag{114}$$

Мы получаем колебание из той же таблицы частот. Как тогда будет выглядеть произведение амплитуд? Чтобы получить таблицу амплитуд, необходимо не только иметь два совпадающих индекса, но и выполнить по этому индексу суммирование:

$$\sum_k A_{nk}B_{km} = (AB)_{nm}. \tag{115}$$

Таким образом, искомое произведение можно определить в виде ($k = l$):

$$\{A_{nk}e^{i\omega_{nk}t}\} \times \{B_{km}e^{i\omega_{km}t}\} = \{(AB)_{nm}e^{i\omega_{nm}t}\}. \tag{116}$$

Но если совпадают другие индексы, то получим несколько другое произведение ($n = m$):

$$\{A_{nk}e^{i\omega_{nk}t}\} \times \{B_{ln}e^{i\omega_{ln}t}\} = \{(BA)_{lk}e^{i\omega_{lk}t}\}. \tag{117}$$

То есть вновь имеем схему элементов Гейзенберга. Умножение схем элементов Гейзенберга становится некоммутативным.

Построим правило дифференцирования схем элементов Гейзенберга:

$$\frac{d}{dt}\{A_{nm}e^{i\omega_{nm}t}\} = \{i\omega_{nm}A_{nm}e^{i\omega_{nm}t}\} = \frac{i}{\hbar}\{(A_{nm}E_n - A_{nm}E_m)e^{i\omega_{nm}t}\} = \tag{118}$$

$$= \frac{i}{\hbar}\sum_k \{E_{nk}A_{km}e^{i\omega_{km}t} - A_{nk}E_{km}e^{i\omega_{nk}t}\} = \frac{i}{\hbar}\sum_k \{E_{nk}A_{km}(t) - A_{nk}(t)E_{km}\} =$$

$$= \frac{i}{\hbar}\{(EA(t))_{nm} - (A(t)E)_{nm}\}.$$

В результате мы приходим к уравнению движения Гейзенберга:

$$\dot{A} = \frac{i}{\hbar}(EA - AE). \tag{119}$$

Из полученного правила дифференцирования можно найти перестановочное соотношение между координатой и импульсом. Для этого рассмотрим одномерное движение точки с энергией:

$$E = \frac{m\dot{q}^2}{2} + V(q). \tag{120}$$

Считая, что оператор координаты q коммутирует с оператором потенциальной энергии $V(q)$, получим:

$$\dot{q} = \frac{i}{\hbar}\frac{m}{2}(\dot{q}^2 q - q\dot{q}^2) = \frac{im}{2\hbar}[\dot{q}(\dot{q}q - q\dot{q}) + (\dot{q}q - q\dot{q})\dot{q}]. \tag{121}$$

Тогда должно выполняться равенство:

$$\dot{q}q - q\dot{q} = \frac{\hbar}{im}; \tag{122}$$

из которого следует коммутационное соотношение Гейзенберга:

$$qp - pq = [q, p] = i\hbar. \tag{123}$$

Проиллюстрируем основные идеи матричной механики на примере линейного гармонического осциллятора. Классический гамильтониан и уравнения движения осциллятора имеют вид:

$$H = E = \frac{p^2}{2m} + \frac{kq^2}{2} = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega_0^2 q^2}{2}, \tag{124}$$

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m}, \ \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} = -m\omega_0^2 q = -kq, \ \ddot{q} + \omega_0^2 q = 0. \tag{125}$$

В матричной механике импульс p и координату q осциллятора следует считать матрицами (схемами, таблицами). Элемент q_{nm} обозначает квантовую

амплитуду перехода из состояния n в состояние m. Каждый элемент матрицы q_{nm} должен удовлетворять уравнению движения осциллятора:

$$\ddot{q}_{nm} + \omega_0^2 q_{nm} = 0. \tag{126}$$

Представляя схему элементов координаты осциллятора в виде $q_{nm}(t) = q_{nm}^0 e^{i\omega_{nm}t}$, получим для нахождения матрицы координаты следующее уравнение:

$$(\omega_0^2 - \omega_{nm}^2) q_{nm} = 0. \tag{127}$$

Поэтому, либо $q_{nm} = 0$, либо $\omega_{nm} = \pm\omega_0$. Частоту ω_0 необходимо связать с каким-то переходом (между какими-то уровнями). Удобно ввести правило: будем считать, что частота $\omega_{nm} = \omega_0$ для перехода $n \to n-1$ (испускание кванта), а частота $\omega_{nm} = -\omega_0$ для перехода $n \to n+1$ (поглощение кванта). Тогда получим, что элементы матрицы координаты

$$q_{nm} = 0, \quad \text{если } m \neq n \pm 1, \quad q_{nm} \neq 0, \text{ если } m = n \pm 1, \tag{128}$$

$$q_{nm} = \begin{pmatrix} q_{00} & q_{01} & q_{02} & q_{03} & \dots \\ q_{10} & q_{11} & q_{12} & q_{13} & \dots \\ q_{20} & q_{21} & q_{22} & q_{23} & \dots \\ q_{30} & q_{31} & q_{32} & q_{33} & \dots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & q_{01} & 0 & 0 & \dots \\ q_{10} & 0 & q_{12} & 0 & \dots \\ 0 & q_{21} & 0 & q_{23} & \dots \\ 0 & 0 & q_{32} & 0 & \dots \end{pmatrix}. \tag{129}$$

Ненулевые элементы матрицы координаты сосредоточены в области главной диагонали. Запишем матрицу импульса:

$$p_{nm} = im\omega_{nm} q_{nm} = im\omega_0 \begin{pmatrix} 0 & -q_{01} & 0 & 0 & \dots \\ q_{10} & 0 & -q_{12} & 0 & \dots \\ 0 & q_{21} & 0 & -q_{23} & \dots \\ 0 & 0 & q_{32} & 0 & \dots \end{pmatrix}. \tag{130}$$

Чтобы найти уровни энергии осциллятора в матричном подходе, вычислим матрицу энергии:

$$q_{nm}^2 = \sum_k q_{nk} q_{km} = \begin{pmatrix} 0 & q_{01} & 0 & 0 & \dots \\ q_{10} & 0 & q_{12} & 0 & \dots \\ 0 & q_{21} & 0 & q_{23} & \dots \\ 0 & 0 & q_{32} & 0 & \dots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & q_{01} & 0 & 0 & \dots \\ q_{10} & 0 & q_{12} & 0 & \dots \\ 0 & q_{21} & 0 & q_{23} & \dots \\ 0 & 0 & q_{32} & 0 & \dots \end{pmatrix} = \tag{131}$$

$$= \begin{pmatrix} q_{10}q_{01} & 0 & q_{01}q_{12} & \dots \\ 0 & q_{10}q_{01} + q_{12}q_{21} & 0 & \dots \\ q_{21}q_{10} & 0 & q_{21}q_{12} + q_{23}q_{32} & \dots \\ 0 & q_{32}q_{21} & 0 & \dots \end{pmatrix},$$

$$p^2_{nm} = -m^2\omega_0^2 \begin{pmatrix} 0 & -q_{01} & 0 & 0 & \dots \\ q_{10} & 0 & -q_{12} & 0 & \dots \\ 0 & q_{21} & 0 & -q_{23} & \dots \\ 0 & 0 & q_{32} & 0 & \dots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -q_{01} & 0 & 0 & \dots \\ q_{10} & 0 & -q_{12} & 0 & \dots \\ 0 & q_{21} & 0 & -q_{23} & \dots \\ 0 & 0 & q_{32} & 0 & \dots \end{pmatrix} = \tag{132}$$

$$= m^2\omega_0^2 \begin{pmatrix} q_{10}q_{01} & 0 & -q_{01}q_{12} & \dots \\ 0 & q_{10}q_{01} + q_{12}q_{21} & 0 & \dots \\ -q_{21}q_{10} & 0 & q_{21}q_{12} + q_{23}q_{32} & \dots \\ 0 & -q_{32}q_{21} & 0 & \dots \end{pmatrix}.$$

В результате матрица энергии линейного гармонического осциллятора принимает диагональный вид:

$$H_{nm} = m\omega_0^2 \begin{pmatrix} q_{10}q_{01} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & q_{10}q_{01} + q_{12}q_{21} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & q_{21}q_{12} + q_{23}q_{32} & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots \end{pmatrix} \tag{133}$$

Кроме того, должно выполняться перестановочное соотношение Гейзенберга:

$$(pq - qp)_{nm} = -2im\omega_0 \begin{pmatrix} q_{10}q_{01} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & -q_{10}q_{01} + q_{12}q_{21} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & -q_{21}q_{12} + q_{23}q_{32} & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots \end{pmatrix} = \tag{134}$$

$$= -i\hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & \dots \end{pmatrix}.$$

Тогда мы получаем дополнительно систему уравнений для фиксации произведений некоторых элементов матриц:

$$q_{10}q_{01} = \frac{\hbar}{2m\omega_0}, \tag{135}$$

$$q_{12}q_{21} - q_{10}q_{01} = \frac{\hbar}{2m\omega_0};$$

$$q_{32}q_{23} - q_{12}q_{21} = \frac{\hbar}{2m\omega_0};$$

.....

$$q_{nn+1}q_{n+1n} = (n+1)\frac{\hbar}{2m\omega_0}.$$

Тогда диагональный элемент в матрице энергии с номером n равен

$$H_{nn} = \epsilon_n = m\omega_0^2(q_{nn+1}q_{n+1n} + q_{nn-1}q_{n-1n}) = \hbar\omega_0\left(n + \frac{1}{2}\right). \qquad (136)$$

Получается такой же результат, что и в теории Планка и Бора за исключением слагаемого $1/2$ в круглых скобках. В рамках матричной механики Гейзенберга была также решена В. Паули и более сложная задача об атоме водорода. Для понимания революционности идей В. Гейзенберга, которые были одобрены Н. Бором и В. Паули (*«Это утренняя заря квантовой теории»*), весьма показательна беседа, которая состоялась в 1926 году между А. Эйнштейном и В. Гейзенбергом сразу после коллоквиума в Берлинском университете, на котором В. Гейзенберг изложил свою теорию.

А. Эйнштейн: *«...Но что касается орбит электронов в атоме, то Вы хотите их совсем упразднить, несмотря на то, что траектории электронов в камере Вильсона можно наблюдать непосредственно.»*

В. Гейзенберг: *«Орбиты электронов в атоме наблюдать нельзя..., но по излучению, исходящему от атомов при разрядке, можно непосредственно заключить о частотах колебаний и о соответствующих амплитудах электронов в атоме. ... это может служить чем-то вроде эрзаца знания электронных орбит.»*

В квантовой механике каждой динамической переменной классической механики следует сопоставить линейный эрмитов оператор. Оператор $\hat{F}$ называется эрмитовым, если для любых функций ψ, ϕ из гильбертова пространства выполняется соотношение:

$$(\phi, \hat{F}\psi) = (\hat{F}\phi, \psi). \qquad (137)$$

Найдем вид операторов координаты и импульса частицы. Принимая во внимание, что волновая функция, с помощью которой мы описываем движение системы, есть функция координат, сопоставим последним, а также их функциям (например потенциальной энергии) оператор умножения. Так, например, оператор координаты $\hat{x}$ переводит ψ-функцию в $x\psi(x)$:

$$\hat{x}\psi(x) = x\psi(x). \qquad (138)$$

Оператор импульса частицы $\hat{p}_x$ следует выбрать в виде:

$$\hat{p}_x = -i\hbar\frac{d}{dx} \tag{139}$$

Такой вид оператора мы вводим, поскольку с одной стороны в оператор Гамильтона уравнения Шредингера входит оператор кинетической энергии $\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$, а с другой волна де Бройля $\psi(x,t) = C\exp\left(\frac{i}{\hbar}(Et - p_x x)\right)$ описывает частицу с энергией E и импульсом p_x. Такая функция является собственной для введенного выше оператора p_x. Здесь следует заметить, что такая волна де Бройля не удовлетворяет условию нормировки волновых функций, которое обсуждалось в предыдущей теме 4. Если импульс известен точно (а для волны де Бройля это именно так), то из соотношения неопределенностей получаем, что неопределенность координаты равна ∞. т.е. частица делокализована по всему бесконечному пространству. Именно такое абсолютно делокализованное состояние и задает плоская волна. Конечно, к реальному состоянию частицы плоская волна прямого отношения не имеет. Это математическая абстракция. Любой физический процесс происходит, может быть и в макроскопически большой, но ограниченной области пространства. Поэтому мы можем утверждать, что состояние частицы с точно определенным значением импульса принципиально невозможно. Но поскольку приближение плоской волны оказывается очень удобным с математической точки зрения, в квантовой механике используют помимо функций с интегрируемым квадратом модуля также и функции, которые обычному условию нормировки не удовлетворяют. Условие нормировки таких функций (непрерывного спектра) рассмотрено ниже.

Чтобы связать операторы с числами, получаемыми при измерениях, в квантовой механике, используется прежде всего тот факт, что для каждого оператора можно найти функции, которые являются его собственными функциями, то есть функции, удовлетворяющие условию:

$$\hat{F}\psi = \lambda\psi. \tag{140}$$

Собственные значения эрмитова оператора λ вещественны. Доказательство этого утверждения ($\lambda = \lambda^*$) следует из цепочки равенств:

$$(\psi, \hat{F}\psi) = (\psi, \lambda\psi) = \lambda(\psi,\psi) = (\hat{F}\psi, \psi) = (\lambda\psi, \psi) = \lambda^*(\varphi, \psi). \tag{141}$$

Собственные функции эрмитова оператора $\hat{F}$, отвечающие различным собственным значениям, ортогональны. Для доказательства этого утверждения рассмотрим две собственные функции ψ_1, ψ_2 эрмитова оператора

$\hat{F}$:

$$\hat{F}\psi_1 = \lambda_1\psi_1, \quad \hat{F}\psi_2 = \lambda_2\psi_2. \tag{142}$$

Выполним следующие преобразования с матричным элементом $(\psi_2, \hat{F}\psi_1)$:

$$(\psi_2, \hat{F}\psi_1) = (\psi_2, \lambda_1\psi_1) = \lambda_1(\psi_2, \psi_1) = (\hat{F}\psi_2, \psi_1) = (\lambda_2\psi_2, \psi_1) = \lambda_2(\psi_2, \psi_1). \tag{143}$$

Поскольку по условию $\lambda_2 \neq \lambda_1$, то $(\psi_2, \psi_1) = 0$. Таким образом, собственные функции эрмитовых операторов можно использовать для построения базиса в гильбертовом пространстве волновых функций.

В общем случае для операторов в квантовой механике выполняется соотношение: $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$ (например, операторы координаты и импульса не коммутируют: $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$. Но есть физические операторы, которые коммутируют, то есть $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = [\hat{A}, \hat{B}] = 0$.

Если операторы имеют общие собственные функции, образующие полную систему, то такие операторы коммутируют.

Пусть ψ_k - собственная функция операторов $\hat{F}$, $\hat{G}$:

$$\hat{F}\psi_k = \lambda_k\psi_k, \quad \hat{G}\psi_k = \mu_k\psi_k. \tag{144}$$

Тогда выполняются следующие равенства:

$$\hat{F}\hat{G}\psi_k = \hat{F}\mu_k\psi_k = \lambda_k\mu_k\psi_k, \quad \hat{G}\hat{F}\psi_k = \hat{G}\lambda_k\psi_k = \lambda_k\mu_k\psi_k. \tag{145}$$

Вычитая из первого уравнения второе, получим: $[\hat{F}, \hat{G}]\psi_k = 0$, то есть эти операторы коммутируют для любой функции из полного набора в гильбертовом пространстве состояний. Прозвольную функцию из гильбертова пространства можно представить в виде разложения по базису: $\psi = \sum_k c_k\psi_k$. Поэтому:

$$[\hat{F}, \hat{G}]\psi = [\hat{F}, \hat{G}]\sum_k c_k\psi_k = \sum_k c_k[\hat{F}, \hat{G}]\psi_k = 0. \tag{146}$$

Если операторы коммутируют, то они имеют общие собственные функции, образующие полную систему.

Докажем это утверждение для случая, когда каждому собственному значению отвечает одна собственная функция (вырождение отсутствует). Пусть

$$\hat{F}\psi = \lambda\psi, \quad \hat{F}\hat{G} = \hat{G}\hat{F}. \tag{147}$$

Тогда

$$\hat{F}(\hat{G}\psi) = \hat{G}(\hat{F}\psi) = \hat{G}\lambda\psi = \lambda(\hat{G}\psi)\,. \tag{148}$$

Таким образом, функция $(\hat{G}\psi)$ является собственной для оператора $\hat{F}$, принадлежащая собственному значению λ. Но по условию и функция ψ есть собственная функция принадлежащая тому же собственному значению. При отсутствии вырождения ψ и $\hat{G}\psi$ описывают одно и тоже состояние: $\hat{G}\psi \sim \psi$, $\hat{G}\psi = \mu\psi$, то есть функция ψ является собственной для оператора $\hat{G}$. Две динамические переменные могут быть одновременно измеримы, если им соответствуют коммутирующие операторы.

Динамические переменные, которым соответствуют некоммутирующие операторы, не могут иметь в одном и том же состоянии определенные значения. Это означает, что при измерении таких динамических переменных мы будем получать для них значения с некоторой неточностью, неопределенностью. Будем характеризовать точность измерений динамической величины A среднеквадратичным отклонением:

$$\overline{\delta A^2} = \overline{(\hat{A} - \overline{A})^2} = \overline{\hat{A}^2} - \overline{A}^2 \tag{149}$$

Пусть мы имеем эрмитовы операторы A, B. Выбирая параметр λ вещественным, рассмотрим оператор $(A + i\lambda B)$. Для такого оператора справедливо неравенство: (аудиторная задача 4):

$$F(\lambda) = \overline{(A + i\lambda B)(A + i\lambda B)^+} \geq 0.$$

Используя результаты ауд. задачи 7, преобразуем это среднее к виду:

$$\overline{(A + i\lambda B)(A - i\lambda B)} = \overline{A^2} + \lambda^2\overline{B^2} - i\lambda\overline{(AB - BA)} \geq 0.$$

Следовательно, среднее значение коммутатора $\overline{[A, B]}$ есть чисто мнимая величина. Минимум последнего выражения достигается при $\lambda_{min} = i\overline{[A, B]}/2\overline{B^2}$. Тогда минимальное значение функции $F(\lambda)$ будет равно:

$$\overline{A^2} + \frac{1}{4}\frac{\overline{[A, B]}^2}{\overline{B^2}} \geq 0.$$

Заменяя здесь операторы A, B на операторы $\delta A = A - \bar{A}$, $\delta B = B - \bar{B}$, получим для них следующее неравенство:

$$\overline{\delta A^2} \cdot \overline{\delta B^2} \geq -\frac{1}{4}\overline{[A, B]}^2 \tag{150}$$

Перепишем это соотношение для операторов координаты и импульса, коммутатор, которых имеет вид: $[q, p] = i\hbar$:

$$\overline{\delta q^2} \cdot \overline{\delta p^2} \geq \frac{\hbar^2}{4}. \tag{151}$$

Введем величины $\Delta q = \sqrt{\overline{\delta q^2}}$, $\Delta p = \sqrt{\overline{\delta p^2}}$, которые будем называть неопределенностями координаты и импульса. Тогда для них выполняется следующее соотношение неопределенностей Гейзенберга:

$$\Delta q \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}. \tag{152}$$

В предыдущем разделе использовалась приближенная форма этого соотношения (109), которая связана с волновыми представлениями де Бройля. Рассмотрим использование соотношения неопределенностей на двух простейших примерах.

1. Пусть состояние квантовой частицы описывается простой плоской волной де Бройля:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}px} \tag{153}$$

В этом состоянии частица имеет строго определенный импульс p, то есть $\Delta p = 0$. Тогда из соотношения неопределенностей следует, что неопределенность координаты $\Delta x \to \infty$. Этот вывод вполне согласуется с нашим представлением плоской волны, которая простирается от минус бесконечности до плюс бесконечности по оси x.

2. Пусть состояние квантовой частицы описывается дельта-функцией Дирака:

$$\psi_{x_0}(x) = \delta(x - x_0). \tag{154}$$

В таком квантовом состоянии координата частицы является строго определенной и равной x_0. Тогда из соотношения неопределенностей следует, что неопределенность импульса $\Delta p \to \infty$. Этот вывод также вполне согласуется с известным интегральным представлением дельта-функции Дирака

$$\delta(x - x_0) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar}p(x-x_0)} dp, \tag{155}$$

в виде суперпозиции волн де Бройля, в которой присутствуют все возможные значения импульса.

Соотношение, аналогичное соотношению неопределенностей Гейзенберга для координаты и импульса частицы, существует, как показал Н. Бор, для произведения неопределенности энергии ΔE и времени взаимодействия Δt системы с измерительным прибором:

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}. \tag{156}$$

Для получения этого соотношения заметим, что неопределенность энергии частицы $E = p^2/2m$ связана с неопределенностью ее импульса

$$\Delta E = \frac{p\Delta p}{m} = v\Delta p. \tag{157}$$

Но скорость определяется по изменению пройденного расстояния Δx за время Δt:

$$\Delta E = \frac{\Delta x}{\Delta t}\Delta p. \tag{158}$$

В результате из соотношения неопределенностей Гейзенберга для координаты и импульса получим соотношение неопределенностей для энергии и времени. Оно означает, что при измерении, длящемся Δt невозможно измерить энергию с точностью лучшей, чем $\hbar/2\Delta t$.

Согласно соотношению неопределенностей Гейзенберга, нет возможности измерить одновременно координату частицы и ее импульс сколь угодно точно. В 1927 г. на пятом Сольвеевском конгрессе А. Эйнштейн выступил против копенгагенской интерпретации Н. Бора и М. Борна, трактующей математическую модель квантовой механики, как существенно вероятностную. Он заявил, что сторонники этой интерпретации из *нужды делают добродетель*, а вероятностный характер свидетельствует лишь о том, что наше знание физической сущности микропроцессов неполно. В 1935 г. А. Эйнштейн, Б. Подольский, Н. Розен написали статью «Можно ли считать квантовомеханическое описание физической реальности полным», в которой они сформулировали мысленный эксперимент, названный впоследствии парадоксом ЭПР. Мысленный эксперимент ЭПР заключался в измерении параметров микрообъекта косвенным образом, не оказывая на этот объект непосредственного воздействия. Целью такого косвенного измерения является попытка извлечь больше информации о состоянии микрообъекта, чем дает квантовомеханическое описание, в том числе соотношение неопределенностей Гейзенберга.

Предполагая, что причиной неопределенности является то, что измерение одной величины вносит принципиально неустранимые возмущения в состояние и производит искажение значения другой величины, можно предложить гипотетический способ, которым соотношение неопределенностей можно обойти. Пусть две одинаковые частицы A, B образовались в результате распада третьей частицы C, которая покоилась. Тогда по закону сохранения импульса

$$\mathbf{P} = \mathbf{p}_A + \mathbf{p}_B = 0, \tag{159}$$

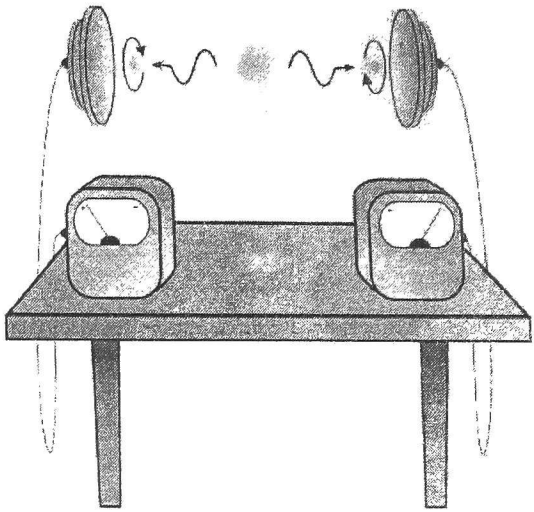

Рис. 19. Иллюстрация эксперимента Эйнштейна-Подольского-Розена.

где $\mathbf{p}_{A,B}$ импульсы частиц A и B. Тогда волновая функция центра масс

$$\Psi(\mathbf{P}) \sim \delta(\mathbf{P}) = \delta(\mathbf{p}_A + \mathbf{p}_B), \tag{160}$$

а в координатном представлении $\Psi(\mathbf{x}_A + \mathbf{x}_B) = const$. Относительное движение характеризуется тем, что в момент измерения частицы находятся на строго заданном расстоянии $\mathbf{l}$ друг от друга:

$$\psi(_A - \mathbf{x}_B) \sim \delta(\mathbf{x}_A - \mathbf{x}_B + \mathbf{l}). \tag{161}$$

В итоге полная волновая функция системы двух частиц равна

$$\Psi_{12} = \Psi(\mathbf{x}_X + \mathbf{x}_B) \cdot \psi(_A - \mathbf{x}_B) = N \cdot \delta(\mathbf{x}_A - \mathbf{x}_B + \mathbf{l}). \tag{162}$$

Пусть мы имеем двух наблюдателей A и B, которые производят измерения с частицами A и B. Описанные волновые функции в координатном и импульсном представлениях говорят о следующем:

1. Если наблюдатель A измеряет координату $\mathbf{x}_A$ первой частицы, то результат измерения координаты $\mathbf{x}_B$ второй частицы предопределен:

$$\mathbf{x}_B = \mathbf{x}_A + \mathbf{l}. \tag{163}$$

2. Если наблюдатель A измеряет импульс первой частицы $\mathbf{p}_A$, то результат измерения импульса частицы B вторым наблюдателем предопределен: $\mathbf{p}_B = -\mathbf{p}_A$.

Подобная ситуация вполне ожидаема. Однако ситуация резко меняется если:

A. Наблюдатель A измеряет координату первой частицы $\mathbf{x}_A$, а наблюдатель B измеряет импульс второй частицы $\mathbf{p}_B$.

B. Наблюдатель B измеряет координату второй частицы $\mathbf{x}_B$, а наблюдатель A измеряет импульс первой частицы $\mathbf{p}_A$.

Интуитивно следовало бы ожидать, что измерение A даст точные значения координаты второй частицы и импульса первой частицы. Поэтому, если два наблюдателя встречаются после проведения измерений, то это могло бы дать способ точного измерения координаты и импульса частицы, что, однако, отрицается принципами квантовой механики. Исходя из этого можно заключить, как сделали ЭПР, что соотношение неопределенностей не является абсолютным, а законы квантовой механики неполными и должны быть уточнены в будущем.

Н. Бор мгновенно отреагировал на статью ЭПР и опубликовал свою короткую работу с таким же названием, в которой он высказал аргументы за вероятностное описание. Объяснение парадокса ЭПР, данное Н. Бором состоит в следующем:

«Эксперимент, описанный ЭПР не противоречит квантовой механике и легко анализируется с ее помощью. Кажущееся противоречие возникает потому, что термин измерение имеет различный смысл в классической и квантовой теории. В квантовой механике в результате измерения происходит изменение состояния системы. Поэтому в A, когда наблюдатель B измеряет импульс второй частицы, она скачкообразно переходит в новое состояние так, что уже нельзя сказать, какая у нее координата. Наблюдатель A измеряет координату первой частицы, но при этом она переходит в новое состояние, в котором ее импульс больше не связан каким-либо соотношением с импульсом второй частицы».

5.2. Примеры решения задач

Задача 1. *Показать, что произвольный оператор F можно представить в виде $F = A + iB$, где A, B эрмитовы операторы.*

Решение:

Пусть дан произвольный оператор F. Введем сопряженный оператор F^+

и составим два оператора:

$$C = F + F^+, \quad D = i(F - F^+).$$

Покажем, что эти операторы эрмитовы. Для этого рассмотрим матричные элементы вида:

$$(\psi, C\phi) = (\psi, (F + F^+)\phi) = ((F^+ + F)\psi, \phi), \ (\psi, D\phi) = (\psi, i(F - F^+)\phi) =$$

$$= i(\psi, (F - F^+)\phi) = i((F^+ - F)\psi, \phi) = (-i(F^+ - F)\psi, \phi) = (i(F - F^+)\psi, \phi).$$

Они показывают, что операторы C, D действительно эрмитовы. Выражая оператор F через операторы C, D, получим выражение:

$$F = \frac{1}{2}\left(C + \frac{1}{i}D\right),$$

которое необходимо было доказать.

Задача 2. *Эрмитов оператор $f(\lambda)$, обладающий дискретным спектром собственных значений, зависит от некоторого параметра λ. Доказать соотношение (теорема Фейнмана-Хеллманна):*

$$\frac{\partial f_n(\lambda)}{\partial \lambda} = \overline{\frac{\partial f(\lambda)}{\partial \lambda}}. \tag{164}$$

Решение:

Для доказательства этой формулы запишем уравнение на собственные значения для оператора $f(\lambda)$, который имеет по условию задачи дискретный спектр:

$$f(\lambda)\psi_n(\lambda) = f_n(\lambda)\psi_n(\lambda).$$

Продифференцируем это уравнение по λ:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial \lambda}\right)\psi_n(\lambda) + f\frac{\partial}{\partial \lambda}\psi_n(\lambda) = \left(\frac{\partial f_n}{\partial \lambda}\right)\psi_n(\lambda) + f_n\frac{\partial}{\partial \lambda}\psi_n(\lambda).$$

Умножим скалярно обе части этого равенства на собственную функцию $\psi_n(\lambda)$:

$$(\psi_n(\lambda), \left(\frac{\partial f}{\partial \lambda}\right)\psi_n(\lambda)) + (\psi_n(\lambda), f\frac{\partial}{\partial \lambda}\psi_n(\lambda)) = \tag{165}$$

$$= (\psi_n(\lambda), \left(\frac{\partial f_n}{\partial \lambda}\right)\psi_n(\lambda)) + (\psi_n(\lambda), f_n\frac{\partial}{\partial \lambda}\psi_n(\lambda)).$$

Преобразуем левую часть этого равенства, используя эрмитовость оператора $f(\lambda)$:

$$(\psi_n(\lambda), f\frac{\partial}{\partial \lambda}\psi_n(\lambda)) = f_n(\psi_n(\lambda), \frac{\partial}{\partial \lambda}\psi_n(\lambda)).$$

Тогда после сокращения подобных членов в левой и правой частях равенства (165) получим соотношение, которое и надо было доказать.

Задача 3. *Оператор $\hat{F}$ вида $\hat{F} = F(f)$, где $F(z)$ некоторая функция переменной z, представимая в виде ряда $F(z) = \sum_n c_n z^n$ можно понимать как оператор, равный $\hat{F} = \sum_n c_n \hat{f}^n$. Используя это определение, найти явный вид оператора $\hat{T}_a = exp\left(a\frac{d}{dx}\right)$.*

Решение:

Представляя оператор $\hat{T}_a$ в виде ряда (используем разложение экспоненты в ряд), получим:

$$\hat{T}_a\psi(x) = \sum_n \frac{a^n}{n!}\left(\frac{d}{dx}\right)^n \psi(x) = \sum_n \frac{a^n}{n!}\psi^{(n)}(x) = \psi(x+a).$$

Таким образом, оператор $\hat{T}_a$ является оператором сдвига.

5.3. Задачи для самостоятельного решения

1. Найти собственные функции и собственные значения следующих операторов: $A = -i\frac{d}{dx}$, если $\psi(x) = \psi(x+L)$, L-постоянная; $A = -\frac{d^2}{dx^2}$, если $\psi(0) = \psi(L) = 0$.

2. Найти оператор сопряженный с оператором $A = x \cdot p_x$, $A = i \cdot p_x$.

3. Доказать, что если операторы A, B эрмитовы и коммутируют, то оператор $C = A \quad B$ - эрмитов.

4. Показать, что средние значения эрмитовых операторов F^+F и FF^+ (где F некоторый линейный оператор) в произвольном состоянии неотрицательны.

5. Вычислить средние значения кинетической и потенциальной энергии осциллятора с частотой ω в основном состоянии $\psi(x) = A \cdot e^{-\alpha^2 x^2}$, где $\alpha^2 = \kappa/2\hbar\omega$, κ - коэффициент квазиупругой силы.

6. Определить возможные собственные значения оператора L_z и их вероятности для системы, находящейся в состоянии: $\psi(\phi) = A \cdot \sin^2\phi$.

7. Доказать, что для произвольных операторов A, B справедливы следующие соотношения:

$$(i \cdot A)^+ = -i \cdot A^+, \quad (A + i \cdot B)^+ = A^+ - i \cdot B^+. \qquad (166)$$

8. В состоянии, описываемом волновой функцией вида

$$\psi(x) = C \cdot exp\left[\frac{ip_0 x}{\hbar} - \frac{(x - x_0)^2}{2a^2}\right],$$

где p_0, x_0, a - вещественные параметры, найти функцию распределения по координатам частицы. Определить средние значения и среднеквадратичные отклонения координаты и импульса частицы.

9. Показать, что если операторы A, B эрмитовы, то операторы $AB + BA$ и $i(AB - BA)$ также эрмитовы.

10. Определить возможные собственные значения оператора L_z и их вероятности для системы, находящейся в состоянии: $\psi(\phi) = A \cdot (1 + \cos\phi)^2$.

11. Найти среднюю кинетическую энергию частицы в одномерной прямоугольной потенциальной яме с абсолютно непроницаемыми стенками $(0 < x < l)$, если частица находится в состоянии $\psi(x) = A \cdot \sin^2(\pi x/l)$.

12. Найти собственные функции и собственные значения неэрмитового оператора $A = x + \frac{d}{dx}$. Являются ли такие функции ортогональными?

13. Плоским ротатором называют систему из двух жестко связанных частиц, вращающихся в плоскости вокруг своего центра инерции. Оператор энергии такого ротатора имеет вид: $H = \frac{\hbar^2}{2I}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}$, где I-момент инерции системы. Полагая, что в начальный момент времени волновая функция ротатора имеет вид $\psi(\phi) = A \cdot \cos^2\phi$, найти эту функцию в момент времени t.

14. Доказать следующее соотношение:

$$e^{\hat{A}}\hat{B}e^{-\hat{A}} = \hat{B} + [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{2}[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \ldots \qquad (167)$$

Указание: выполнить дифференцирование следующей функции: $f(\lambda) = e^{\lambda\hat{A}}\hat{B}e^{-\lambda\hat{A}}$.

15. Найти собственные функции и собственные значения матричного оператора $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$.

16. Написать нормированные соответствующим образом собственные функции радиуса-вектора $\psi_{\mathbf{r}_0}$ и импульса $\psi_{\mathbf{p}_0}$ в координатном и импульсном представлениях. Указание: для перехода от координатного представления к импульсному представлению использовать формулу:

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \psi(\mathbf{p}) e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{p}. \qquad (168)$$

5.4. Биографическое примечание

- **Гейзенберг**, Вернер Карл (5.12.1901-01.02.1976), выдающийся немецкий физик-теоретик, один из создателей квантовой механики. Работы посвящены квантовой механике, квантовой электродинамике, релятивистской квантовой теории поля, теории ядра, физике элементарных частиц и космических лучей. Разработал матричную механику (Нобелевская премия 1932 г.). Сформулировал принцип неопределенностей. Выдвинул идею об обменном взаимодействии, разработал квантовомеханическую теорию ферромагнетизма. Предложил протон-нейтронную модель ядра. Ввел понятие изотопического спина, построил теорию ядерных сил. Ввел матрицу рассеяния.

- **Борн**, Макс (11.12.1882-05.01.1970), немецкий физик-теоретик, один из создателей квантовой физики. Работы посвящены квантовой теории, термодинамике кристаллов, теории относительности, кинетической теории газов и жидкостей, атомной физике. Один из создателей квантовой механики (Нобелевская премия 1954 г.). Предложил способ расчета электронных оболочек атомов. Разработал метод решения квантовомеханических задач о столкновении частиц. Ввел в квантовую механику понятие оператора. Разработал теорию строения двухатомных молекул.

6. УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

6.1. Одномерное уравнение Шредингера. Туннельный эффект. Краткая теория

В случае дискретного спектра энергии условие нормировки волновой функции имеет вид:

$$\int_{\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1. \tag{169}$$

Рассмотрим условие нормировки волновых функций непрерывного спектра. Пусть мы имеем свободное движение частицы:

$$\psi''(x) + k^2\psi(x) = 0, \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{p^2}{\hbar^2}. \tag{170}$$

Считая, что k может принимать и положительные, и отрицательные значения, мы можем представить решение в виде:

$$\psi(x) = A\exp(ikx). \tag{171}$$

В результате нормировочный интеграл для такой волновой функции расходится. В этом случае используют два метода нормировки волновых функций.

1. Метод Борна.

В методе Борна на волновую функцию накладывается условие периодичности. Для этого вводят длину периодичности и считают, что волновая функция не меняется при сдвиге на эту длину:

$$\psi(x) = \psi(x+L), \quad Ae^{ikx} = Ae^{ik(x+L)}, \quad e^{ikL} = 1, \quad k_n = \frac{2\pi n}{L}, \tag{172}$$

где n-целое число. Энергия свободного движения частицы равна:

$$E_n = \frac{p^2}{2m} = \frac{2\pi^2\hbar^2 n^2}{mL^2}. \tag{173}$$

Если предположить, что частица находится на отрезке $-\frac{L}{2} \le x \le \frac{L}{2}$, то из условия нормировки получим:

$$\int_{-L/2}^{L/2} \psi^*(x)\psi(x)dx = A^2 \quad L = 1, \quad A = \frac{1}{\sqrt{L}}. \tag{174}$$

Тогда нормированные волновые функции имеют вид:

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i\frac{2\pi n}{L}x}. \tag{175}$$

Мы сделали непрерывный спектр дискретным вводя длину периодичности. Если $L \to \infty$, то дискретный спектр переходит в непрерывный. Действительно, разность энергий ΔE между соседними уровнями равна:

$$\Delta E = \frac{2\pi^2\hbar^2 \cdot 2n}{mL^2}\Delta n,\ \Delta n = 1,\ p = mv = \frac{2\pi\hbar}{L},\ \Delta E = \frac{2\pi\hbar}{L}v.$$

Следовательно, если $L \to \infty$, то $\Delta E \to 0$, то есть спектр становится непрерывным.

2. Нормировка на δ-функцию Дирака.

Пусть в гильбертовом пространстве состояний имеется базис $\{\psi_n\}_{n=1}^{\infty}$, по которому можно разложить любую волновую функцию:

$$\psi(x) = \sum_n c_n\psi_n,\quad c_n = \int \psi_n^*(x')\psi(x')dx',\ \psi(x) = \sum_n \int \psi_n^*(x')\psi(x')dx'\cdot\psi_n(x). \tag{176}$$

Переставим здесь операции суммирования и интегрирования:

$$\psi(x) = \int \{\sum_n \psi_n^*(x')\psi_n(x)\}\psi(x')dx' \tag{177}$$

и введем следующее обозначение для суммы по n:

$$\delta(x - x') = \sum_n \psi_n^*(x')\psi_n(x). \tag{178}$$

Введенный символ $\delta(x - x')$ должен иметь следующее свойство:

$$\psi(x) = \int \delta(x - x')\psi(x')dx' \tag{179}$$

Для обоснования перестановки суммирования и интегрирования, сделанной выше, можно вначале определить другую функцию:

$$\delta(x' - x, \alpha) = \sum_n e^{-\alpha|n|}\psi_n^*(x')\psi_n(x). \tag{180}$$

Под знак суммы была введена затухающая экспонента так, что ряд является сходящимся. Функция $\delta(x' - x)$ называется дельта-функцией Дирака.

Построим для нее конкретное выражение в случае свободного движения частицы, для которого мы знаем вид волновых функций $\psi_n(x)$:

$$\delta(x'-x)=\frac{1}{L}\sum_{n=-\infty}^{\infty}e^{\frac{2\pi n}{L}i(x-x')}. \tag{181}$$

Введем переменную $k=2\pi n/L$, $\Delta k=2\pi/L$. При $L\to\infty$ $\Delta k\to 0$, и сумма, определяющая дельта-функцию, переходит в интеграл:

$$\delta(x-x')=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}e^{ik(x-x')}dk=\frac{1}{\pi}\int_0^{\infty}\cos k(x-x')dk. \tag{182}$$

Это выражение называется интегральным представлением для дельта-функции Дирака:

$$\psi(x)=\frac{1}{\pi}\int_0^{\infty}dk\int dx'\cos k(x-x')\psi(x'). \tag{183}$$

Здесь порядок интегрирования является существенным: вначале по x', потом по k. Если же мы хотим изменить порядок интегрирования, то нужно использовать размазанную дельта-функцию:

$$\delta(x'-x,\alpha)=\frac{1}{\pi}\int_0^{\infty}e^{-\alpha k}\cos k(x'-x)dk, \tag{184}$$

$$\psi(x)=\lim_{\alpha\to 0}\int\psi(x')dx'\left[\frac{1}{\pi}\int_0^{\infty}dke^{-\alpha k}\cos k(x'-x)\right]. \tag{185}$$

Интеграл в правой части можно вычислить:

$$\delta(x'-x,\alpha)=\frac{1}{\pi}\frac{\alpha}{\alpha^2+(x-x')^2}. \tag{186}$$

Эта размазанная дельта-функция Дирака или дельта-образная последовательность сходится к дельта-функции Дирака при $\alpha\to 0$. Предыдущее равенство иногда записывают в виде

$$\psi(x)=\frac{1}{\pi}\int dx'\psi(x')\int_0^{\infty}\cos k(x-x')dk, \tag{187}$$

понимая его в виде (185). Рассмотрим теперь нормировку на дельта-функцию Дирака. Пусть $\psi(p,x)=A\exp(\frac{i}{\hbar}px)$, тогда:

$$\int_{\infty}^{\infty}\psi^*(p',x)\psi(p,x)dx=A^2\int_{-\infty}^{\infty}e^{\frac{i}{\hbar}(p-p')x}dx= \tag{188}$$

$$= A^2\hbar 2\pi\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{i(p-p')\xi}d\xi = \delta(p'-p).$$

Чтобы имела место нормировка на дельта-функцию Дирака, должно быть: $A = 1/\sqrt{2p\hbar}$. Тогда с учетом этого значения нормировочной константы A получим функцию

$$\psi(p,x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{\hbar}px} \tag{189}$$

Рассмотрим теперь одно из важнейших квантовомеханических явлений, которое делает движение частиц принципиально неклассическим. Речь идет о так называемом туннельном эффекте, то есть возможности туннелирования (просачивания) частицы через область классически запрещенного движения.

Пусть на потенциальный барьер, конечной высоты V_0 и ширины a падает волна с энергией $E < V_0$. Рассмотрим решение уравнения Шредингера:

$$\psi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - V(x)\right)\psi(x) = 0. \tag{190}$$

Найдем решения этого уравнения последовательно в трех областях I, II, III.

1. Область I, $x < 0$.

$$\psi''(x) + k^2\psi(x) = 0, \quad \psi_1(x) = e^{ikx} + B_1e^{-ikx}, k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E.$$

2. Область II, $0 < x < a$.

$$\psi''(x) - \kappa^2\psi(x) = 0, \quad \kappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E), \quad \psi_2(x) = A_2e^{-\kappa x} + B_2e^{\kappa x}$$

3. Область III, $a < x$.

$$\psi''(x) + k^2\psi(x) = 0, \quad \psi_3(x) = A_3e^{ik(x-a)}, \quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E.$$

Исходя из физического смысла волновой функции, мы считаем, что она непрерывна при переходе из одной области пространства в другую в случае гладкого изменения потенциала. Тогда из уравнения Шредингера (190) непосредственно следует, что и ее первая производная по координате x также непрерывно меняется во всем пространстве. Запишем граничные условия в точках $x = 0$ и $x = a$:

$$1 + B_1 = A_2 + B_2, \quad ik(1 - B_1) = \kappa(B_2 - A_2),$$

$$A_2 e^{-\kappa a} + B_2 e^{\kappa a} = A_3, \quad -\kappa A_2 e^{-\kappa a} + \kappa B_2 e^{\kappa a} = ikA_3.$$

Из последних уравнений можно выразить A_2, B_2 через A_3:

$$A_2 = e^{\kappa a}\frac{1}{2}(1 - i\frac{k}{\kappa})A_3, \quad B_2 = e^{-\kappa a}\frac{1}{2}(1 + i\frac{k}{\kappa})A_3.$$

Подставляя эти значения в граничное условие при $x = 0$ и исключая B_1, получим выражение для амплитуды прохождения частицы под барьером:

$$A_3 = \frac{2}{2\operatorname{ch}\kappa a + i(\frac{\kappa}{k} - \frac{k}{\kappa})\operatorname{sh}\kappa a}.$$

Найдем теперь коэффициент прохождения частицы под барьером D:

$$D = \frac{|j_{\text{пр}}|}{|j_{\text{пад}}|} = |A_3|^2 = \frac{4k^2\kappa^2}{4k^2\kappa^2 + (k^2 + \kappa^2)^2 \operatorname{sh}^2 \kappa a}.$$

Если барьер достаточно широкий, так что $\kappa a \gg 1$, то $\operatorname{sh}\kappa a \approx \frac{1}{2}e^{\kappa a}$, и коэффициент прохождения частицы под барьером приводится к виду:

$$D = \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - E)}}. \tag{191}$$

В случае барьера более сложной формы из этой формулы непосредственно получаем, считая предэкспоненциальный множитель приближенно равным единице:

$$D \approx \exp\left(-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2m(V(x) - E)}dx\right), \tag{192}$$

где x_1 и x_2 - координаты точек, между которыми $V(x) > E$. Это выражение используется обычно при решении задач.

Рассмотрим теперь одно физическое явление, которое было известно задолго до создания квантовой механики, но физическую суть которого удалось понять только в рамках концепции туннелирования. Автоэлектронной эмиссией называют явление испускания электронов проводящими телами под действием внешнего электрического поля достаточно большой напряженности. В отличие от термоэлектронной эмиссии, когда эмиссионный ток возникает в результате нагрева поверхности и образования некоторой доли горячих электронов, способных покинуть поверхность, автоэлектронная эмиссия не связана с нагревом поверхности и потому называется холодной или полевой эмиссией. Явление автоэлектронной эмиссии было экспериментально обнаружено Р.Вудом в 1897 году, в 1928-1929 гг. Р.Фаулером и

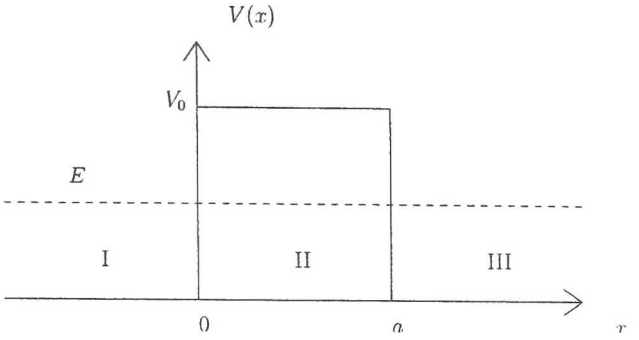

Рис. 20. Прохождение частицы сквозь потенциальный барьер, $E < V_0$

Л.Нордхеймом была предложена теоретическая модель, в основе которой лежит представление о туннелировании электронов через потенциальный барьер.

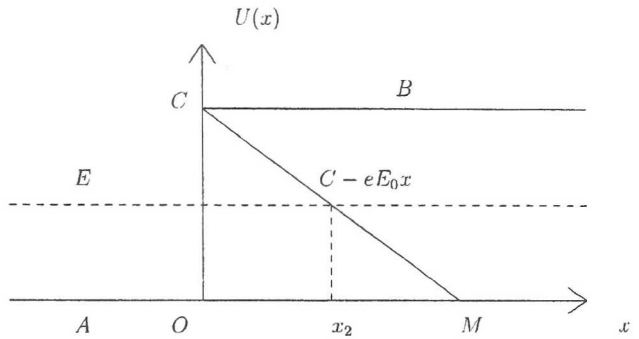

Рис. 21. Потенциальная энергия электрона во внешнем электрическом поле E_0.

В отсутствии внешнего электрического поля потенциальная энергия электрона представляется на рис.18 ступенчатой линией AOCB (начало координат находится на стенке металла). Внутри металла потенциальная энергия постоянна, ее полагают равной нулю. Вне металла потенциальная энергия тоже постоянна и равна C. Если наложить внешнее электрическое поле $\mathbf{E}_0$, направленное к металлу, то в металл оно не проникнет. Внутри металла потенциальная энергия электрона по-прежнему равна нулю. Снаружи металла ($x > 0$) потенциальная энергия $U(x) = C - eE_0x$. Вид потенциального барьера OCM между металлом и вакуумом представлен на

рис.18. Выделим в металле группу электронов с энергией $E < C$. Вычислим проницаемость барьера по формуле (192) полагая $x_1 = 0$, $x_2 = (C-E)/eE_0$:

$$D(E) = D_0 \exp\left(-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2m(C - eE_0x - E)}dx\right) = \qquad (193)$$

$$= D_0 \exp\left[-\frac{4}{3}\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\frac{(C-E)^{3/2}}{eE_0}\right]$$

Считая, что плотность тока автоэмиссии пропорциональная туннельной прозрачности барьера для электронов, энергия которых лежит вблизи граничной энергии Ферми, из (193) получаем теоретическую зависимость туннельного тока от напряженности электрического поля:

$$I(E_0) = I_0 \exp\left(-\frac{\alpha}{E_0}\right), \quad \alpha = -\frac{4}{3}\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\frac{(C-E)^{3/2}}{eE_0}. \qquad (194)$$

Такая зависимость тока автоэмиссии хорошо согласуется с экспериментальными данными.

6.2. Примеры решения задач

Задача 1. *Частица с массой m находится в одномерной прямоугольной потенциальной яме с абсолютно непроницаемыми стенками $(0 < x < l)$. Найти: а) собственные значения энергии и нормированные собственные функции частицы, b) вероятность нахождения частицы с наименьшей энергией в области $l/3 < x < 2l/3$, c) число энергетических уровней в интервале $(E, \quad E + dE)$.*

Решение:

Одномерное стационарное уравнение Шредингера для частицы в потенциале $U(x)$ имеет вид:

$$\Psi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U(x))\Psi(x) = 0. \qquad (195)$$

Внутри ямы $(0 < x < l)$ $U(x) = 0$, тогда уравнение Шредингера можно записать в виде:

$$\Psi''(x) + k^2\Psi(x) = 0,$$

где $k^2 = 2mE/\hbar^2$ Общее решение последнего уравнения имеет вид:

$$\Psi(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx).$$

В силу того, что стенки потенциальной ямы абсолютно непроницаемые $\Psi(0) = \Psi(l) = 0$. Отсюда сразу находим:

$$B = 0, \qquad A\sin(kl) = 0.$$

Так как $A \neq 0$ (иначе имеем только тривиальное решение $\Psi(x) = 0$), $\sin(k \cdot l) = 0$. Из последнего уравнения получаем условие квантования волнового вектора:

$$k_n = \frac{\pi n}{l}, \quad n = 1, 2, ...$$

Таким образом, собственные значения энергии частицы определяются следующим выражением:

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ml^2} n^2$$

Из условия номировки квадрата модуля волновой функции нетрудно найти нормировочную константу A:

$$\int_0^l |\Psi(x)|^2 dx = 1 \quad \Longrightarrow \quad A^2 = 1/\int_0^l \sin^2(\frac{\pi x n}{l})dx, \quad A = \sqrt{\frac{2}{l}}.$$

Волновая функция основного состояния ($n = 1$) имеет вид:

$$\Psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{l}}\sin(\frac{\pi x}{l}).$$

Вероятность найти частицу в области $l/3 < x < 2l/3$ дается выражением:

$$P(l/3 < x < 2l/3) = \int_{l/3}^{2l/3} |\Psi(x)|^2 dx = \frac{2}{l}\int_{l/3}^{2l/3} \sin^2(\frac{\pi x}{l})dx,$$

$$P(l/3 < x < 2l/3) = \frac{1}{3} + \frac{\sqrt{3}}{2\pi} = 0.609.$$

Если уровни расположены достаточно плотно, мы можем считать, что n принимает непрерывный ряд значений и

$$E(n) = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ml^2}.$$

Отсюда следует:

$$dE = \frac{\hbar^2\pi^2}{ml^2} n dn, \quad \frac{dn}{dE} = \frac{l}{\hbar\pi}\sqrt{\frac{m}{2E}}.$$

Задача 2. *Найти с помощью уравнения Шредингера энергию гармонического осциллятора с частотой ω в стационарном состоянии: $\Psi(x) = Bx\exp(-\alpha^2 x^2)$, где B, α постоянные.*

Решение:

Одномерное стационарное уравнение Шредингера для частицы в потенциале $U(x) = m\omega^2 x^2/2$ (гармонический осциллятор) имеет вид:

$$\Psi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2)\Psi(x) = 0.$$

Если $\Psi(x) = Bx\exp(-\alpha^2 x^2)$, то $\Psi''(x) = (-6\alpha^2 + 4\alpha^4 x^2)\Psi(x)$. Подставляя $\Psi''(x)$ в уравнение Шредингера и приравнивая коэффициенты при одинаковых степенях x к нулю, получаем систему из двух уравнений:

$$-6\alpha^2 + \frac{2mE}{\hbar^2} = 0, \quad 4\alpha^4 - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2} = 0.$$

Решение данной системы дает $E = \frac{3}{2}\hbar\omega$.

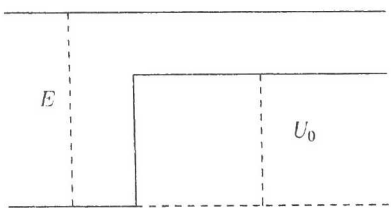

Рис. 22. Прохождение частицы сквозь потенциальный барьер, $E > U_0$

Задача 3. *Частица массы m падает на прямоугольный потенциальный барьер высотой U_0 (см. Рис.4). Энергия частицы равна E, причем $E > U_0$. Найти коэффициент отражения барьера R и коэффициент прозрачности D.*

Решение:

Одномерное стационарное уравнение Шредингера для частицы в потенциале $U(x)$ имеет вид:

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

Если $U(x) = U_o = Const$, тогда уравнение Шредингера можно записать в виде:

$$\Psi''(x) + k^2\Psi(x) = 0,$$

где $k^2 = 2m(E - U_o)/\hbar^2$. В нашем случае, решение уравнения Шредингера имеет вид:

$$x \le 0, \quad \Psi_1(x) = a_1 \exp(ik_1x) + b_1 \exp(-ik_1x), \quad k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar,$$

$$x \ge 0, \quad \Psi_2(x) = a_2 \exp(ik_2x) + b_2 \exp(-ik_2x), \quad k_2 = \sqrt{2m(E - U_o)}/\hbar.$$

Пусть падающая слева направо волна характеризуется амплитудой a_1, тогда $b_2 = 0$. Коэффициенты D и R определяются через отношения плотностей потоков падающих, прошедших и отраженных от барьера частиц:

$$D = \frac{J_{\text{прош}}}{J_{\text{пад}}}, \quad R = \frac{J_{\text{отр}}}{J_{\text{пад}}}.$$

Поскольку $J_k = \frac{\hbar k}{m}|a_k|^2$, то

$$R = \frac{|b_1|^2}{|a_1|^2}, \quad D = \frac{k_2^2|a_2|^2}{k_1^2|a_1|^2}.$$

В силу условия непрерывности волновой функции и ее производной

$$(\Psi_1(0) = \Psi_2(0), \quad \Psi_1'(0) = \Psi_2'(0))$$

получаем систему из двух уравнений, связывающих амплитуды a_1, a_2, b_1:

$$a_1 + b_1 = a_2, \quad k_1a_1 - k_1b_1 = k_2a_2.$$

Решение системы дает:

$$a_2 = \frac{2\,a_1\,k_1}{k_1 + k_2}, \quad b_1 = -a_1 + \frac{2\,a_1\,k_1}{k_1 + k_2}, \quad D = \frac{4\,k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2}, \quad R = \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2}.$$

Нетрудно проверить, что $R + D = 1$.

6.3. Задачи для самостоятельного решения

1. В одномерной прямоугольной потенциальной яме с абсолютно непроницаемыми стенками ($0 < x < l$) находится частица в состоянии $\psi(x)$. Определить вероятность ее пребывания

   а) в основном состоянии, если $\psi(x) = A \cdot \sin^2(\pi x/l)$.

   б) на n-уровне, если $\psi(x) = Ax(l - x)$. Вычислить значения вероятности для первых трех уровней.

2. Имея ввиду, что собственны функции оператора волнового числа $\hat{k}$ ($\hat{k} = \hat{p}/\hbar$) есть $\psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}$, найти распределение вероятностей различных значений волнового числа k:

   а) для частицы на n-уровне в одномерной прямоугольной потенциальной яме шириной l с абсолютно непроницаемыми стенками;

   б) для осциллятора в состоянии $\psi(x) = A \exp(-\alpha^2 x^2)$.

3. Частица массы m находится в основном состоянии в одномерной потенциальной яме шириной l с бесконечно высокими стенками. Найти: а) силу давления, которую оказывает частица на стенку; b) работу, которую необходимо совершить, чтобы медленно сжать яму в η раз.

4. Частица массы m находится в трехмерной прямоугольной потенциальной яме с абсолютно непроницаемыми стенками. Длина ребер ямы равна a, b, c. Найти собственные значения энергии частицы.

5. Частица массы m падает на прямоугольную потенциальную яму шириной l и глубиной U_0. Энергия частицы вне ямы равна E. Найти коэффициент прозрачности ямы D.

6. С помощью формулы для коэффициента прозрачности D потенциального барьера $U(x)$:

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

   где x_1 и x_2 - координаты точек, между которыми $U > E$, найти вероятность прохождения частицы массы m и энергии E сквозь потенциальный барьер $U(x) = U_0(1 - x^2/l^2)$.

7. Найти уровни энергии и нормированные волновые функции состояний дискретного спектра частицы в поле $U(x) = -\alpha\delta(x)$, $\alpha > 0$. Найти средние значения кинетической и потенциальной энергии в этих состояниях.

8. Найти решение временного уравнения Шредингера для свободной частицы, имеющей импульс p и движущейся в произвольном направлении.

9. Частица массы m находится в одномерной потенциальной яме $U(x) = U_0$ при $|x| > a$, $U(x) = 0$ при $|x| \leq a$. Найти энергию основного состояния, если на краях ямы $\Psi-$функция вдвое меньше, чем в середине ямы: $\Psi(-a) = \Psi(a) = 0.5 \cdot \Psi(0)$.

10. Зная собственные функции и собственные значения энергии квантового гармонического осциллятора, найти собственные значения энергии частицы массы m, движущейся в одномерном потенциальном поле $U(x) = \kappa x^2/2$ при $x > 0$ и $U(x) = \infty$ при $x \leq 0$.

11. Частица массы m падает слева на прямоугольный потенциальный барьер высотой U_0. Энергия частицы $E < U_0$. Найти эффективную глубину проникновения частицы под барьер, т.е. расстояния от границы барьера до той точки, в которой плотность вероятности нахождения частицы уменьшается в $e = 2.73$ раз.

12. С помощью формулы для коэффициента прозрачности D потенциального барьера $U(x)$:

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

где x_1 и x_2 – координаты точек, между которыми $U > E$, найти вероятность прохождения частицы массы m и энергии E сквозь потенциальный барьер $U(x) = 0$ при $x < 0$ и $x > l$, $U(x) = U_o(1 - x/l)$ при $0 \leq x \leq l$.

13. Найти собственные волновые функции и собственные значения энергии материальной точки массы m, которая движется в потенциальном поле ямы конечной глубины, расположенной симметрично относительно начала координат. Решения искать в классе четных ($\psi(x) = \psi(-x)$) и нечетных ($\psi(-x) = -\psi(x)$) функций.

14. Частица находится в основном состоянии в одномерном потенциальном поле $U(x) \sim x^2$. Какова вероятность пребывания ее вне классических границ поля ?

15. Частица находится в двумерной прямоугольной потенциальной яме с абсолютно непроницаемыми стенками, занимающей область $0 < x < a$, $0 < y < b$. Определить вероятность нахождения частицы с наименьшей энергией в области $0 < x < a/3$, $0 < y < b/3$.

6.4. Биографическое примечание

- **Ландау**, Лев Давидович (22.01.1908-01.04.1968), выдающийся советский физик-теоретик, академик, лауреат Ленинской премии 1960 г., Герой Социалистического Труда 1968 г., Лауреат Нобелевской премии по физике 1962 года. Работы относятся к квантовой механике, квантовой электродинамике, квантовой теории поля, теории многоэлектронных систем, статистической физике, теории элементарных частиц.

- **Ферми** Энрико (29.09.1901-20.10.1954), выдающийся итальянский физик-теоретик, один из создателей квантовой механики (Нобелевская премия 1938 г.). Работы относятся к квантовой механике, квантовой электродинамике, квантовой теории поля, теории элементарных частиц, теории гравитации. Разработал математический аппарат квантовой механики, выдвинул гипотезу существования элементарного магнитного заряда, разработал статистику частиц с полуцелым спином (статистика Ферми-Дирака).

7. ДВИЖЕНИЕ В ЦЕНТРАЛЬНОМ ПОЛЕ. АТОМ ВОДОРОДА

7.1. Движение в центральном поле. Атом водорода. Краткая теория

Движение в центрально-симметричном поле представляет собой одну из фундаментальных задач квантовой механики. Эта задача легла в основу построения квантовой теории атома водорода, многоэлектронных атомов, молекул, теории рассеяния. Потенциальная энергия электрона зависит от расстояния r до некоторой фиксированной точки - силового центра. Для

описания движения электрона в центральном поле удобно ввести сферические координаты r, θ, ϕ. Стационарное уравнение Шредингера в сферических координатах

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{Ze^2}{r}\right]\psi(r,\theta,\phi) = E\psi(r,\theta\phi),$$

где Ze-заряд ядра атома, ∇^2-оператор Лапласа, который имеет следующий вид в сферических координатах:

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\nabla^2_{\theta,\phi};$$

$$\nabla^2_{\theta,\phi} = \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2},$$

где $\nabla^2_{\theta,\phi}$-угловая часть оператора Лапласа. Разделить переменные r, θ, ϕ можно, положив

$$\psi(r,\theta,\phi) = R(r)\ \ Y(\theta,\phi). \tag{196}$$

Подставив данное выражение в уравнение Шредингера и обозначив постоянную разделения λ, найдем выражение для радиальной и угловой частей:

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + \left[\frac{2m}{\hbar^2}\left(E + \frac{Ze^2}{r}\right) - \frac{\lambda}{r^2}\right]R = 0. \tag{197}$$

$$\frac{1}{\sin\ \theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\ \theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2 0}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2} + \lambda Y = 0. \tag{198}$$

В угловом уравнении также можно разделить переменные θ, ϕ, положив: $Y(\theta,\phi) = \Theta(\theta)\Phi(\phi)$. Обозначив постоянную разделения в этом случае через m^2, получим два обыкновенных дифференциальных уравнения, определяющее $\Phi(\phi)$ и $\Theta(\theta)$:

$$\frac{d^2\Phi(\phi)}{d\phi^2} + m^2\Phi(\phi) = 0, \tag{199}$$

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta(\theta)}{d\theta}\right) + \left(\lambda - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\right)\Theta(\theta) = 0. \tag{200}$$

Решение простейшего уравнения для функции $\Phi(\phi)$ представим в виде:

$$\Phi(\phi) = Ae^{im\phi}. \tag{201}$$

Из требования однозначности $\Phi(\phi) = \Phi(\phi + 2\pi)$ следует, что $m = 0, \pm1, \pm2, \ldots$. Из условия нормировки $(\Phi_l, \Phi_n) = \delta_{ln}$, получаем, что $A =$

$1/\sqrt{2\pi}$. Рассмотрим решение уравнения для функции $\Theta(\theta)$, которое в начале перепишем в терминах переменной $x = \cos\theta$:

$$(1 - x^2)\Theta''(x) - 2x\Theta'(x) + \left(\lambda - \frac{m^2}{1 - x^2}\right)\Theta(x) = 0$$

Поскольку точки $x = \pm 1$ являются особыми Будем искать решение в виде:

$$\Theta(x) = (1 - x^2)^{\frac{s}{2}} u().$$

Уравнение для функции $u(x)$ примет вид:

$$(1 - x^2)u''(x) - 2x(s + 1)u'(x) + [\lambda - s - s^2 + \frac{s^2 - m^2}{1 - x^2}]u(x) = 0.$$

Мы можем исключить особенность в последнем слагаемом, выбрав $s = \pm m$. Решения с этими двумя значениями s удовлетворяют одному и тому же уравнению и должны отличаться только на константу. Далее рассмотрим решение для положительного значения $s = m \geq 0$:

$$(1 - x^2)u''(x) - 2x(m + 1)u'(x) + [\lambda - m(m + 1)]u(x) = 0. \qquad (202)$$

Будем искать решение этого уравнения в виде ряда: $u(x) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k x^k$. Подставляя его в дифференциальное уравнение, находим рекуррентное соотношение для коэффициентов ряда

$$a_{k+2} = -a_k \frac{\lambda - (k + m)(k + m + 1)}{(k + 1)(k + 2)} a_k, \qquad (203)$$

которое позволяет построить два линейно независимых решения. Из рекуррентного соотношения следует, что ряд может превратиться в конечный полином степени q, и мы получим тогда физическое, нормированное на единицу решение уравнения, если $\lambda = (q + m)(q + m + 1)$, q=0, 1, 2, ... целое число. Ведем число $l = (q + m)$, которое назовем орбитальным квантовым числом: $l \geq 0$, $\lambda = l(l + 1)$. Полиномиальные решения более удобно находить с помощью дифференциальной формулы:

$$\Theta_{lm}(x) = \sqrt{\frac{(2l + 1)(l - m)!}{2(l + m)!}} \cdot P_l^m(x), \quad P_l^m(x) = (1 - x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}}(x^2 - 1)^l \frac{1}{2^l l!}. \qquad (204)$$

Второе линейно независимое решение не удовлетворяет условию нормировки и может быть отброшено. В результате угловая часть волновой функции

электрона, движущегося в произвольном потенциальном поле имеет вид:

$$Y_{lm}(\theta,\phi)=\sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}}e^{im\phi}P_l^m(\cos\theta). \tag{205}$$

Найдем теперь радиальную волновую функцию $R(r)$ электрона, движущегося в кулоновском потенциальном поле, для которой имеем следующее дифференциальное уравнение:

$$R''(r)+\frac{2}{r}R'(r)+\left(-A+\frac{2B}{r}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right)R(r)=0. \tag{206}$$

где $A=-2mE/\hbar^2$, $B=m(Ze^2)/\hbar^2$. Введем безразмерную переменную $\rho=2\sqrt{A}r$ и перепишем уравнение в терминах этой переменной:

$$R''+\frac{2}{\rho}R'+\left(-\frac{1}{4}+\frac{B}{\sqrt{A}}\frac{1}{\rho}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right)R=0. \tag{207}$$

Необходимо найти решение этого уравнения, которое бы удовлетворяло условию нормировки:

$$\int_0^\infty r^2dr|R(r)|^2=1. \tag{208}$$

Рассотрим асимптотику решений при $\rho\to 0$, $\rho\to\infty$.

1) При $\rho\to\infty$ дифференциальное уравнение и его решения принимают вид:

$$R''-\frac{1}{4}R=0,\quad R_\infty=C_1e^{-\frac{\rho}{2}}+C_2e^{\frac{\rho}{2}}.$$

Физическая асимптотика решения отвечает случаю, когда $C_2=0$.

2) При $\rho\to 0$ дифференциальное уравнение имеет вид:

$$R''+\frac{2}{\rho}R'-\frac{l(l+1)}{\rho^2}R=0.$$

Решение этого однородного уравнения можно искать в виде $R\sim\rho^s$, а для значений показателя степени s получаем: $s_1=l$, $s_2=-(l+1)$. Второй корень нужно отбросить, так как он приводит к неормированному решению. В результате после выделения асимптотик можно искать решение для радиальной волновой функции в виде:

$$R(\rho)=\rho^le^{-\frac{\rho}{2}}u(\rho), \tag{209}$$

а для неизвестной функции $u(\rho)$ получим уравнение:

$$\rho u'' + [2(l+1) - \rho]u' + [\frac{B}{\sqrt{A}} - l - 1]u = 0. \tag{210}$$

Ищем решение этого уравнения в виде ряда: $u(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k$ После необходимых дифференцирований и подстановки его в уравнение получим рекуррентное соотношение для коэффициентов ряда:

$$a_{k+1} = -a_k \frac{\frac{B}{\sqrt{A}} - l - 1 - k}{(k+1)(k+2l+2)}, \tag{211}$$

которое позволяет найти и сами решения. Нормированные физические решения полиномиального вида (полиномы Лагерра) можно получить, если выполняется условие:

$$\frac{B}{\sqrt{A}} = n_r + l + 1, \quad n_r = 0, 1, 2 \ldots, \tag{212}$$

где радиальное квантовое число обозначает максимальную степень полинома. Если ввести главное квантовое число $n = n_r + l + 1$, то предыдущее условие обрыва ряда и превращения его в полином приведет к условию квантования уровней энергии:

$$E_n = -\frac{m(Ze^2)^2}{2n^2\hbar^2}. \tag{213}$$

Полиномы Лагерра можно вычислять с помощью удобной дифференциальной формулы:

$$Q_k^s(\rho) = e^{\rho}\rho^{-s}\frac{d^k}{d\rho^k}\left(e^{-\rho}\rho^{k+s}\right). \tag{214}$$

Вычисляя нормировочный коэффициент из условия нормировки, получим окончательно радиальную волновую функцию в виде:

$$R_{nl}(r) = \left(\frac{Z}{na_0}\right)^{3/2}\sqrt{\frac{4}{n(n-l-1)!(n+l)!}}e^{-\frac{Zr}{na_0}}\left(\frac{2Zr}{na_0}\right)^l Q_{n-l-1}^{(2l+1)}\left(\frac{2Zr}{na_0}\right), \tag{215}$$

где мы подставили $\rho = 2Zr/na_0$, $a_0 = \hbar^2/m(ze^2)$-первый боровский радиус. Уровни энергии нумеруются главным квантовым числом $n = 1, 2, 3, \ldots$. Орбитальное квантовое число l принимает значения $l = 0, 1, 2, ..., n-1$, а магнитное квантовое число $m = 0, \pm 1, \pm 2, ..., \pm l$. Таким образом оказывается, что одному и тому же значению энергии отвечает сразу несколько

волновых функций. Такой уровень энергии называют вырожденным. Кратность вырождения уровня определяется числом:

$$\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1) = 1+3+5+...+2n-1 = \frac{n}{2}(2n-1+1) = n^2 \qquad (216)$$

На Рис. 23 представлены графики трех радиальных волновых функций R_{32}, R_{42}, R_{52} при фиксированном значении орбитального квантового числа $l = 2$. С ростом $n(n_r)$ число узлов волновой функции возрастает.

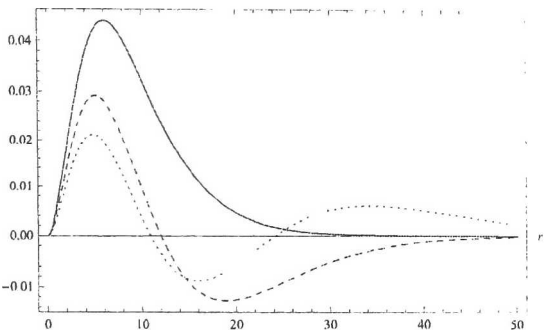

Рис. 23. Радиальные волновые функции электрона в атоме водорода R_{32} (сплошная), R_{42} (пунктирная), R_{52} (точечная).

Вырождение по магнитному квантовому числу m характерно для любого центрального поля и связано с равноправностью всех направлений, проходящих через начало координат. Вырождение по орбитальному квантовому числу l характерно для кулоновского потенциала. Оно связано с наличием в случае кулоновского потенциального поля еще одного оператора $\hat{\boldsymbol{\epsilon}}$ (оператор вектора эксцентриситета), который является интегралом движения, то есть коммутирует с гамильтонианом, но не коммутирует с оператором $\mathbf{L}^2$ Этот эрмитов оператор имеет вид:

$$\hat{\epsilon}_i = \frac{r_i}{r} + \frac{1}{2mZe^2}\epsilon_{ijk}(L_j p_k + p_k L_j). \qquad (217)$$

Группе японских физиков под руководством Ю. Икухара удалось получить фотографии атома водорода, на которых видно распределение электронной плотности, полностью совпадающее с теоретическими расчетами (см. Рис. 24). Изображения были получены с использованием фотоионизационного микроскопа, а суть метода заключалась в последовательной

ионизации атомов водорода - отрывании от них электрона с помощью электромагнитного облучения. Затем отделившиеся электроны направляют на чувствительную матрицу через положительно заряженное кольцо, которое отклоняет электроны в сторону и выполняет роль линзы, увеличивая изображение в миллионы раз.

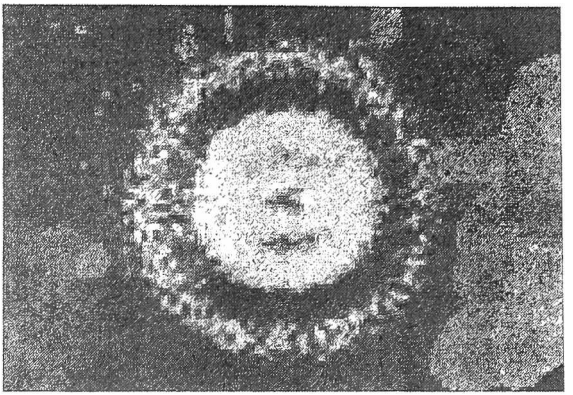

Рис. 24. На данной фотографии представлено первое прямое изображение орбит электрона вокруг атома, полученное с помощью квантового микроскопа.

7.2. Примеры решения задач

Задача 1. *Найти поправку к уровням энергии водородоподобного атома за счет релятивистской зависимости массы частицы от скорости в первом порядке теории возмущений.*

Решение:

Релятивистская поправка к функции Гамильтона заряженной частицы в электростатическом поле в классической теории согласно формуле

$$H = \sqrt{\mathbf{p}^2c^2 + m^2c^4} - \frac{Ze^2}{r} - mc^2 \approx \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{\mathbf{p}^4}{8m^3c^2} - \frac{Ze^2}{r} \qquad (218)$$

равна $\Delta H_{rel} = -\mathbf{p}^4/8m^3c^2$. Квантовомеханическим обобщением этой поправки является оператор $\Delta\hat{H}_{rel} = -\hat{\mathbf{p}}^4/8m^3c^2$, рассматриваемый как воз-

мущение гамильтониана, который коммутирует с операторами $\mathbf{L}^2, L_z$. Поправка к уровням энергии, обусловленная взаимодействием $\Delta\hat{H}_{rel}$, определяется следующим образом:

$$\Delta E^{rel}_{n_r l} = \int \psi^{0\ *}_{n_r lm} \Delta\hat{H}_{rel} \psi^0_{n_r lm} d^3r = \tag{219}$$

$$= -\frac{1}{2mc^2} < n_r lm| \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m}\right)^2 |n_r lm> = -\frac{1}{2mc^2} < n_r lm|\hat{H}_0^2 + \hat{H}_0 \frac{Ze^2}{r} +$$

$$+\frac{Ze^2}{r}\hat{H}_0 + \left(\frac{Ze^2}{r}\right)^2 |n_r lm>,$$

где H_0-невозмущенный гамильтониан водородоподобного атома, а $\psi^0_{n_r lm}$ его собственные функции:

$$\hat{H}_0 \psi^0_{n_r lm} = E^0_n \psi^0_{n_r lm}, \quad E^0_n = -\frac{m(Zc^2)^2}{2\hbar^2 n^2} \tag{220}$$

После этого расчет поправки первого порядка сводится к вычислению двух матричных элементов:

$$< n_r lm|\frac{Ze^2}{r}|n_r lm> = -2E^0_n, \quad < n_r lm|\frac{1}{r^2}|n_r lm> = -\frac{4mE^0_n}{(2l+1)\hbar^3 n} \tag{221}$$

Для расчета первого матричного элемента можно использовать теорему вириала, а для вычисления второго - следующую формулу:

$$\frac{\partial f_n(\lambda)}{\partial\lambda} = < \psi_{f_n}(\lambda)|\frac{\partial\hat{f}}{\partial\lambda}|\psi_{f_n}(\lambda) > \tag{222}$$

где эрмитов оператор $\hat{f}(\lambda)$ зависит от некоторого вещественного параметра λ, а $f_n(\lambda)$ собственное значение этого оператора (в качестве параметра необходимо выбрать l).

В результате получаем:

$$\Delta E^{rel}_{n_r l} = \left(\frac{Ze^2}{\hbar c}\right)^2 \left\{-\frac{3}{4n^2} + \frac{2}{(2l+1)n}\right\} E^0_n. \tag{223}$$

Отсюда видно, что учет релятивистской поправки полностью снимает случайное вырождение уровней в кулоновском поле: уровень с данным n расщепляется на n компонент в соответствии с возможными значениями момента l=0,1,... , (n-1) для невозмущенного уровня.

Задача 2. *Найти средний потенциал $\phi(r)$ электростатического поля, создаваемого протоном и электроном, находящихся в атоме водорода в $1S$-состоянии.*

Решение:

Нормированная волновая функция электрона, находящегося в $1S$-состоянии, как показано выше, имеет вид:

$$\psi_{10}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}}. \tag{224}$$

Тогда, учитывая вероятностную интерпретацию волновой функции, плотность заряда электронного облака равна:

$$\rho(r) = -e|\psi_{10}(r)|^2 = -\frac{e}{\pi a_0^3} e^{-\frac{2r}{a_0}}. \tag{225}$$

Потенциал этого электронного облака найдем из решения уравнения Пуассона:

$$\Delta\phi(r) = -4\pi\rho(r) = \frac{4e}{a_0^3} e^{-\frac{2r}{a_0}}. \tag{226}$$

Используя здесь выражение для оператора Лапласа в сферических координатах, получим:

$$\phi''(r) + \frac{2}{r}\phi'(r) = \frac{4e}{a_0^3} e^{-\frac{2r}{a_0}}. \tag{227}$$

Это уравнение можно домножить на r и переписать в более удобном виде для последующего решения:

$$\frac{d^2}{dr^2}[r \cdot \phi(r)] = \frac{4e}{a_0^3} r e^{-\frac{r}{a_0}}. \tag{228}$$

После двух последовательных интегрирований этого уравнения, получим решение для потенциала $\phi(r)$:

$$\phi(r) = \left(\frac{e}{r} + \frac{e}{a_0}\right) e^{-\frac{2r}{a_0}} + A + B\frac{1}{r}.$$

Константы интегрирования A, B находим из граничных условий, накладываемых на потенциал электронной оболочки: $\phi(0) = 0$, $\phi(\infty) = 0$. В

результате получим окончательное выражение для потенциала электронного облака в атоме водорода ($1S$-состояние):

$$\phi(r) = \left(\frac{e}{r} + \frac{e}{a_0}\right) e^{-\frac{2r}{a_0}} - \frac{e}{r}. \tag{229}$$

Потенциал, который создает протон на расстоянии r является кулоновским. Поэтому искомый суммарный потенциал электронного облака и ядра представим в виде:

$$\phi(r) = \left(\frac{e}{r} + \frac{e}{a_0}\right) e^{-\frac{2r}{a_0}}. \tag{230}$$

Задача 3. *Показать, что функции, получающиеся в результате действия операторов $L_\pm = L_x \pm iL_y$ на собственные функции Y_{lm} оператора проекции момента на ось z, также являются собственными функциями оператора L_z $Y_{lm\pm1}$.*

Решение:

Используя коммутационные соотношения для операторов L_x, L_y, L_z, переставим операторы L_z и $L_\pm$ в произведении вида $L_zL_\pm$ (далее преобразования выполнены для оператора L_+):

$$L_zL_+ = L_z(L_x + iL_y) = i\hbar L_y + L_xL_z + i(L_yL_z - i\hbar L_x) = \tag{231}$$

$$\hbar(L_x + i\hbar L_y) + (L_x + iL_y)L_z = L_+(L_z + \hbar).$$

Аналогично проверяется второе равенство: $L_zL_\pm = L_\pm(L_z \pm \hbar)$. Подействуем теперь этим операторным равенством на Y_{lm}:

$$L_zL_\pm Y_{lm} = (m \pm 1)\hbar(L_\pm Y_{lm}). \tag{232}$$

Следовательно, функции $L_\pm Y_{lm}$ тоже являются собственными для оператора L_z, но с собственными значениями $(m \pm 1)\hbar$, то есть это функции $Y_{lm\pm1}$: $L_+Y_{lm} \sim Y_{lm+1}$, $L_-Y_{lm} \sim Y_{lm-1}$. Чтобы найти явный вид входящих сюда коэффициентов, воспользуемся явным видом операторов орбитального момента в сферических координатах:

$$L_x = i\hbar(\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \operatorname{ctg}\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}). \tag{233}$$

$$L_y = -i\hbar(\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \operatorname{ctg}\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}), \quad L_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}.$$

Тогда, например, повышающий оператор примет вид:

$$L_+ = e^{i\phi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i\operatorname{ctg}\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right). \tag{234}$$

Подействуем теперь этим оператором на сферическую волновую функцию:

$$(\frac{\partial}{\partial\theta} - m\operatorname{ctg}\theta)P_l^m(x) = [-\sqrt{1-x^2}\frac{\partial}{\partial x} - \frac{mx}{\sqrt{1-x^2}}]P_l^m(x) = -P_l^{m+1}, \tag{235}$$

$$L_+Y_{lm} = -\hbar\sqrt{(l+m+1)(l-m)}Y_{lm+1}. \tag{236}$$

Аналогично проверяется второе равенство:

$$L_-Y_{lm} = -\hbar\sqrt{(l+m)(l-m+1)}Y_{lm-1}. \tag{237}$$

7.3. Задачи для самостоятельного решения

1. Электрон в атоме водорода находится в стационарном состоянии, описываемом сферически-симметричной волновой функцией $\psi(r) = A(1+ar)e^{\alpha r}$, где A, a, α - постоянные. Найти:

   а) постоянные a, α и энергию электрона (с помощью уравнения Шредингера);

   b) нормировочный коэффициент A.

2. Возможные значения проекции момента импульса на произвольную ось равны $m\hbar$, где m - l, l-1, ..., -l. Имея в виду, что эти проекции равновероятны, а оси равноправны, показать: в состоянии с определенным значением l среднее значение квадрата момента импульса $< \mathbf{L}^2 >= \hbar^2 l(l+1)$.

3. Вычислить расстояния, на которых радиальная часть вероятности местоположения электрона в атоме водорода имеет максимум в $2P$- и $3D$-состояниях, если известны радиальные части волновых функций в данных состояниях:

$$R_{2P}(r) = A_2 re^{-\frac{r}{2a_0}}, \quad R_{3D}(r) = A_3 r^2 e^{-\frac{r}{3a_0}}, \tag{238}$$

   где a_0-первый боровский радиус.

4. Вычислить среднее значение квадрата момента импульса в состоянии: $\psi(\theta, \phi) = A \cdot \sin\theta \cos\phi$.

5. Найти для 1S-электрона в атоме водорода:

   а) наиболее вероятное расстояние от ядра $r_{\text{вер.}}$ и вероятность нахождения электрона в области $r < r_{\text{вер.}}$;

   б) вероятность нахождения его вне классических границ поля.

6. Найти средний электростатический потенциал, создаваемый $1S$ электроном в центре атома водорода.

7. Вычислить в первом порядке теории возмущений сдвиги S-уровней водородоподобных атомов, обусловленные неточечностью ядра. Распределение заряда в ядре считать сферически симметричным. Оценить значение поправки, рассматривая ядро как равномерно заряженный шар радиуса $R \approx 1.2 \times 10^{-13} A^{1/3}$ см, $A \approx 2Z$, A-массовое число ядра.

8. Атом водорода в нормальном состоянии находится на расстоянии $r = 2.5$ см от длинного прямого проводника с током $I = 10$ А. Найти силу действующую на атом.

9. Показать, что функция вида

$$\psi_l(\mathbf{r}) = \epsilon_{ik\ldots n} x_i x_k \ldots x_n f(r), \tag{239}$$

   где $f(r)$ - произвольная функция, $\epsilon_{ik\ldots n}$ -симметричный по любой паре индексов тензор ранга l с равным нулю следом, $\epsilon_{iip\ldots n} = 0$, является собственной функцией оператора квадрата орбитального момента частицы, отвечающей значению момента равному l.

10. Согласно предыдущей задаче наиболее общая зависимость от угловых переменных θ, ϕ волновой функции состояния частицы с моментом $l = 1$ имеет вид $\psi_{l=1} = (\boldsymbol{\epsilon}\mathbf{n})$, $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$. Какому условию удовлетворяет вектор $\boldsymbol{\epsilon}$ в случае нормировки волновой функции на единицу:

$$\int |\psi_{l=1}|^2 d\Omega = 1.$$

11. Найти волновые функции стационарных состояний и уровни энергии плоского ротатора с моментом инерции I. Какова кратность вырождения уровней энергии? (Ротатором называется вращающаяся (в плоскости или в пространстве) система из двух жестко связанных друг

с другом частиц. Момент инерции ротатора равен $I = \mu a^2$, где μ - приведенная масса частиц, a - расстояние между ними.

12. Найти энергетические уровни частицы дискретного спектра в двумерном поле $U(\rho) = -\alpha/\rho$. Определить кратность вырождения уровней. Сравнить со случаем кулоновского поля $U(r) = -\alpha/r$.

13. Как изменяются значения $E_{n_r l}$ энергетических уровней частицы в дискретном спектре при фиксированном значении l с увеличением n_r, при фиксированном значении n_r с увеличением l?

14. Получить приближенное значение энергии основного состояния частицы в кулоновском потенциальном поле $U(r) = -\alpha/r$ вариационным методом, используя пробные функции вида $\psi(r) = C\exp(-\alpha^2 r^2)$, a, α - вариационные параметры. Сравнить с точным значением.

7.4. Биографическое примечание

- **Фок**, Владимир Александрович (22.12.1898-27.12.1974), выдающийся советский физик-теоретик, академик, лауреат Ленинской премии 1960 г., Герой Социалистического Труда 1968 г. Работы относятся к квантовой механике, квантовой электродинамике, квантовой теории поля, теории многоэлектронных систем, статистической физике, теории относительности и гравитации. Разработал теорию атома водорода, использовал методы теории групп, открыл скрытую симметрию в атоме водорода. В 1930 г. создал метод самосогласованного поля для объяснения спектра атомов (метод Хартри-Фока). В 1932 г. предложил метод рассмотрения систем с переменным числом частиц в конфигурационном пространстве (метод вторичного квартования в пространстве Фока).

- **Дирак** Поль Андриен Морис (8.08.1902-20.10.1984), выдающийся английский физик-теоретик, один из создателей квантовой механики (Нобелевская премия 1933 г.). Работы относятся к квантовой механике, квантовой электродинамике, квантовой теории поля, теории элементарных частиц, теории гравитации. Разработал математический аппарат квантовой механики, открыл обменное взаимодействие, построил релятивистскую теорию движения электрона, предложил релятивистское волновое уравнение, предсказал существование антича-

стиц, выдвинул гипотезу существования элементарного магнитного заряда, разработал статистику частиц с полуцелым спином (статистика Ферми-Дирака).

8. СПИН ЭЛЕКТРОНА. МНОГОЭЛЕКТРОННЫЕ АТОМЫ. СПЕКТРЫ, РЕНТГЕНОВСКИЕ СПЕКТРЫ. ЭЛЕКТРОННАЯ ОБОЛОЧКА АТОМОВ

8.1. Состояние электронов в атоме. Краткая теория

В опыте Штерна-Герлаха пучок атомов серебра проходил через щель и попадал в неоднородное магнитное поле, в котором он расщеплялся на две компоненты (см. рис.21) Они осаждались на экране в виде двух полосок, расположенных симметрично относительно проекции щели на экран. Атомы серебра не обладают в основном состоянии орбитальным моментом, поэтому объяснение этого опыта можно было дать, предположив, что электроны в атоме серебра обладают еще собственным магнитным моментом и связанным с ним собственным механическим моментом, который получил название спина (впервые эта идея высказана двадцатилетним американцем Р. Кронигом в начале 1925 г., но первая печатная работа по этому вопросу была опубликована Дж. Уленбеком и С. Гаудсмитом тоже в 1925 г.). Проекция магнитного момента электрона на ось z, по которой было направлено магнитное поле должна была принимать два значения. Результаты измерений дали $\mu_z = \pm\frac{e}{mc}\frac{\hbar}{2} = \pm\mu_B$. Проекция собственного механического момента принимает два значения $s_z = \pm\frac{\hbar}{2}$. После введения спина электрона не только магнитные свойства, но и мультиплетное расщепление спектральных линий атомов (см. темы 9-10) нашли свое объяснение.

В квантовой механике поведение частицы описывается при помощи волновой функции, зависящей от координат и времени $\psi(z, y, z, t)$. Но состояние электрона со спином определяется еще одной переменной проекцией спина на ось z, принимающей два значения $\pm\frac{\hbar}{2}$. Таким образом, ψ-функция электрона со спином представляет собой совокупность двух независимых функций: $\psi_1(x, y, z, t, +\frac{\hbar}{2})$ и $\psi_2(x, y, z, t, -\frac{\hbar}{2})$. При этом ψ_1 описывает электрон с положительной проекцией спина на ось z, а ψ_2 - с отрицательной проекцией спина. Эти две функции объединяют в одну и записывают в

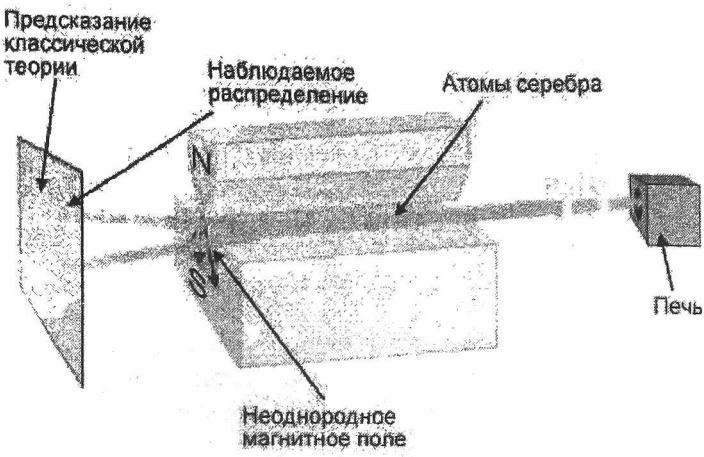

Рис. 25. Эксперимент Штерна-Герлаха.

виде матрицы-столбца (двухкомпонентный спинор Паули):

$$\psi(x,y,z,t,s_z) = \begin{pmatrix} \psi_1(x,y,z,t,+\frac{\hbar}{2}) \\ \psi_2(x,y,z,t,-\frac{\hbar}{2}) \end{pmatrix}. \tag{240}$$

Для полной формулировки квантовой механики электрона со спином необходимо ввести новую динамическую переменную - спин $\hat{\mathbf{s}}$. Это должен быть векторный эрмитов оператор, похожий на орбитальный момент количества движения. Обозначим его декартовы компоненты $\hat{s}_x$, $\hat{s}_y$, $\hat{s}_z$. Эти операторы должны быть матрицами 2×2, так как они действуют в пространстве двухкомпонентных спиноров Паули. Потребуем, чтобы операторы $\hat{s}_x$, $\hat{s}_y$, $\hat{s}_z$ удовлетворяли тем же коммутационным соотношениям, что и операторы орбитального момента электрона:

$$\hat{s}_x\hat{s}_y - \hat{s}_y\hat{s}_x = i\hbar\hat{s}_z,\ \hat{s}_y\hat{s}_z - \hat{s}_z\hat{s}_y = i\hbar\hat{s}_x,\ \hat{s}_z\hat{s}_x - \hat{s}_x\hat{s}_z = i\hbar\hat{s}_y. \tag{241}$$

Перепишем эти коммутационные соотношения, выделяя размерный фактор $\hbar/2$ ($\hat{\mathbf{s}} = \frac{\hbar}{2}\hat{\boldsymbol{\sigma}}$):

$$\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y - \hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x = 2i\hbar\hat{\sigma}_z,\ \hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z - \hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_y = 2i\hbar\hat{\sigma}_x,\ \hat{\sigma}_z\hat{\sigma}s_x - \hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_z = 2i\hbar\hat{\sigma}_y. \tag{242}$$

Выберем оператор $\hat{\sigma}_z$ в диагональном виде

$$\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \tag{243}$$

что отвечает двум возможным проекциям спина на ось z. Тогда $\hat{\sigma}_z^2 = I$ (единичная матрица). В силу равноправности всех трех осей координат должно быть $\hat{\sigma}_x^2 = \hat{\sigma}_y^2 = I$. Преобразуем следующее тождество:

$$\hat{\sigma}_y^2\sigma_z - \hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_y^2 = 0,$$

$$\hat{\sigma}_y(\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z - \hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_y) + (\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z - \hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_y)\hat{\sigma}_y = 0,$$

$$\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x + \hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y = 0.$$

Следовательно, матрицы Паули $\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$, $\hat{\sigma}_z$ антикоммутируют: $\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y = -\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_z = -\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_y = -\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z$. Используя эти результаты в коммутационных соотношениях, получим:

$$\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y = i\hat{\sigma}_z,\ \hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_x = i\hat{\sigma}_y,\ \hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_y = i\hat{\sigma}_x. \tag{244}$$

Будем далее искать матрицу $\hat{\sigma}_x$ в виде:

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 \\ a_3 & a_4 \end{pmatrix}.$$

Из условия антикоммутации этой матрицы с матрицей $\hat{\sigma}_z$ получим:

$$\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} a_1 & -a_2 \\ a_3 & -a_4 \end{pmatrix} = -\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_x = -\begin{pmatrix} a_1 & a_2 \\ -a_3 & -a_4 \end{pmatrix}.$$

Следовательно, $a_1 = a_4 = 0$, а из условия $\hat{\sigma}_x^2 = I$ тогда следует, что $a_2a_3 = 1$. Наконец, накладывая условие эрмитовости на оператор $\hat{\sigma}_x$, получим: $a_2 = a_3^*$, $a_3 = a_2^*$. Тогда, $|a_2|^2 = |a_3|^2 = 1$. Это позволяет представить $a_2 = e^{i\alpha}$. Выбирая далее $\alpha = 0$ (все обсуждавшиеся соотношения будут при этом выполняться), получим:

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \tag{245}$$

Учитывая полученные результаты для оператора спина электрона, квадрат оператора спина электрона $\hat{\mathbf{s}}^2$ можно представить в виде:

$$\hat{\mathbf{s}}^2 = \frac{\hbar^2}{4}\left(\hat{\sigma}_x^2 + \hat{\sigma}_y^2 + \hat{\sigma}_z^2\right) = \frac{3}{4}\hbar^2 = s(s+1)\hbar^2. \tag{246}$$

Таким образом, условие квантования квадрата собственного механического момента имеет такой же вид как и условие квантования квадрата орбитального механического момента с собственным значением $s = \frac{1}{2}$. Операторы

$\hat{\mathbf{s}}^2$ и $\hat{s}_z$ одновременно измеримы (они коммутируют), что ясно видно из соответствующих выражений.

Перейдем к рассмотрению многоэлектронных систем, состоящих из некоторого числа абсолютно одинаковых частиц (электронов). В основе исследования их свойств лежит уравнение Шредингера для волновой функции атома $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, ..., \mathbf{r}_N)$, смысл которой остается прежним:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi, \quad \hat{H} = -\sum\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla_i^2 - \sum\frac{Ze^2}{r_i} + \frac{1}{2}\sum_{i\neq k}\frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_k|}. \qquad (247)$$

Нахождение точных решений уравнения Шредингера с таким гамильтонианом практически невыполнимо из-за невозможности разделения переменных. Если же взаимодействие отсутствует, то переменные разделяются, и мы находим собственные волновые функции отдельных электронов $\psi_i(\mathbf{r}_i)$. Их произведение будет удовлетворять уравнению Шредингера, а $E = \sum_{i=1}^{N} E_i$. В действительности произведение $\prod_{i=1}^{N}\psi_i\mathbf{r}_i)$ не является правильной волновой функцией системы электронов, так как отдельные электроны неразличимы. В классической механике отдельные электроны представляются материальными точками, и они различимы. Существует возможность их различать, то есть проследить за движением отдельного электрона по своей траектории. В квантовой же теории микрочастицы обладают принципиально другими свойствами. Все электроны имеют одинаковые параметры (массу, заряд, спин) и не существует физических способов отличить один электрон от другого. Электоны не имеют точных траекторий, и нет никакой возможности проследить за отдельным электроном. В качестве примера рассмотрим столкновение двух электронов. Пока они движутся далеко друг от друга, их в принципе можно различать (см. Рис. 26).

После взаимодействия электронов уже невозможно сказать, какой электрон рассеялся вниз, а какой вверх. Поэтому в квантовой механике электроны считаются тождественными. Это свойство обуславливает характерные особенности многочастичных систем.

Рассмотрим для простоты систему с двумя тождественными электронами. Две частицы называются тождественными, если все физические свойства этих частиц в точности совпадают, что исключает возможность различать их экспериментально. Поменяем местами два электрона. Поскольку электроны абсолютно тождественны, такая перестановка не приведет ни к каким изменениям, и не может быть обнаружена экспериментально. Со-

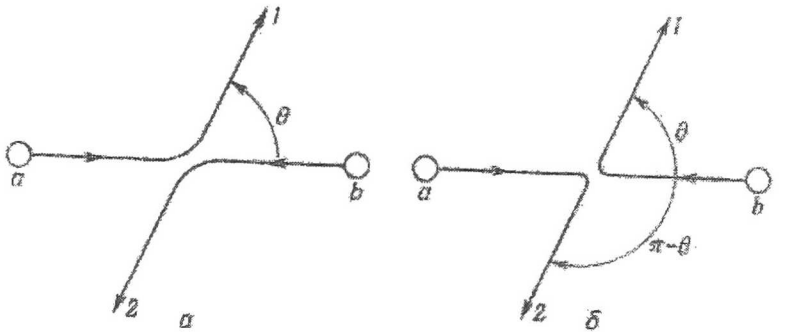

Рис. 26. Рассеяние электронов (иллюстрация к принципу тождественности частиц).

стояния квантовой системы, получающиеся друг из друга перестановками одинаковых частиц местами, следует рассматривать как одно и тоже состояние. Пусть для определенности наша система состоит из двух электронов и описывается волновой функцией $\psi(x_1, x_2)$, x_1, x_2 - совокупность координат первой и второй частиц. Введем оператор перестановки P, который меняет местами частицы. В силу сформулированного выше принципа тождественности имеем:

$$P\psi(x_1, x_2) = \psi(x_2, x_1) = a\psi(x_1, x_2), P^2\psi(x_1, x_2) = a^2\psi(x_1, x_2) = \psi(x_1, x_2). \tag{248}$$

Отсюда следует, что $a = \pm 1$:

$$\psi(x_1, x_2) = \pm\psi(x_2, x_1). \tag{249}$$

Таким образом, при перестановки частиц волновая функция либо не меняется (симммстричная волновая функция), либо меняет знак (антисиммстричная волновая функция). Обозначая совокупность пространственных и спиновых координат частиц цифрами 1 и 2, мы можем записать свойства допустимых волновых функций в виде:

$$\psi_S(1, 2) = \psi_S(2, 1), \quad \psi_A(1, 2) = -\psi_A(2, 1). \tag{250}$$

Предположим для простоты, что частицы не взаимодействуют друг с другом. Тогда волновую функцию системы двух частиц можно представить в виде произведения волновых функций отдельных частиц ψ_1, ψ_2. Тогда

$$\psi_S = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_1(1)\psi_2(2) + \psi_1(2)\psi_2(1)\right], \quad \psi_A = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_1(1)\psi_2(2) - \psi_1(2)\psi_2(1)\right]. \tag{251}$$

Заметим, что антисимметричную волновую функцию можно представить в виде определителя:

$$\psi_A = \begin{vmatrix} \psi_1(1) & \psi_1(2) \\ \psi_2(1) & \psi_2(2) \end{vmatrix}$$

Как нам уже известно, в случае электрона, движущегося в центральном поле значку 1 соответствуеь тройка квантовых чисел n_1, l_1, m_1, а значку 2 тройка n_2, l_2, m_2. Если бы два электрона оказались в одном и том же состоянии ($\psi_1 = \psi_2$), то антисимметричная волновая функция обращается в нуль.

В природе существует два типа частиц. Одни частицы, имеющие целый спин, например фотоны, характеризуются тем, что их системы описываются симметричными волновыми функциями. Другие частицы, имеющие полуцелый спин, например электроны, протоны, нейтроны, описываются антисимметричными волновыми функциями. Частицы первого типа называют бозонами, а второго - фермионами.

Системы электронов встречаются в природе только в состояниях, описываемых антисимметричными волновыми функциями.

Это положение называется принципом Паули. Из него вытекает важное следствие: *в определенном квантовом состоянии может находиться не более одного электрона.*

Принцип Паули необходим для понимания строения электронных оболочек атомов. Поэтому дадим и другую формулировку принципа, используемую в атомной физике. Поскольку волновая функция атомного электрона однозначно задается квантовыми числами n, l, j, m или n, l , m_l, m_s, то можно утверждать, что в атоме не может быть двух электронов, характеризующихся одним и тем же набором квантовых чисел.

Возвращаясь к описанию многоэлектронного атома после установления общего вида волновой функции, возникает вопрос о том, как приближенно учесть взаимодействие электронов. Этой цели служит введение понятия самосогласованного поля. Идея самосогласованного поля состоит в том, что каждый электрон атома находится в некотором эффективном поле, создаваемым как ядром, так и самими электронами. Приближенно это поле полагается центрально-симметричным. Введение самосогласованного поля позволяет разделить переменные в уравнении Шредингера и найти волновые функции отдельных электронов, а затем построить и волновую функцию атома.

Среди многоэлектронных атомов выделяются атомы щелочных метал-

лов: литий, натрий, калий, рубидий, цезий, франций. Они имеют один внешний электрон, который в нормальном состоянии является s- электроном. Их спектры являются типичными одноэлектронными спектрами. В отличие от атома водорода и водородоподобных ионов, в которых ядро непосредственно воздействует на единственный электрон, в атомах щелочных металлов на внешний электрон воздействует не только ядро, но и экранирующие его внутренние оболочки. Если атом щелочного металла имеет всего Z электронов, то можно считать, что $(Z-1)$ электронов вместе с ядром образуют сравнительно прочный остов, в электрическом поле которого движется внешний валентный электрон, довольно слабо связанный с остовом атома. При такой постановке вопроса атом щелочного металла может рассматриваться как одноэлектронный атом, в котором роль ядра играет указанный остов. В первом приближении поле остова можно рассматривать как суперпозицию поля точечного заряда $(+e)$ и поля точечного диполя $\mathbf{p}$, расположенных в центре остова. Напомним здесь, что электрическое поле диполя имеет вид: $\mathbf{E} = 3\mathbf{r}(\mathbf{pr})/r^3 - \mathbf{p}/r^3$. При этом ось диполя направлена все время к валентному электрону. *Поэтому движение этого внешнего электрона происходит так, как если бы поле остова, несмотря на искажение, сохранялось сферически симметричным.*

Соответствующая потенциальная энергия внешнего электрона в поле такого остова может быть представлена в виде:

$$U(r) = -\frac{e^2}{r} - C\frac{e^2}{r}. \tag{252}$$

где C - некоторая постоянная. В принятом приближении к обычной энергии водородоподобного атома добавляется слагаемое $-Ce^2/r^2$, которое имеет такую же структуру в уравнении Шредингера, что и центробежная энергия $\hbar^2 l(l+1)/2mr^2$. Объединяя их в общую сумму, получим:

$$\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - C\frac{e^2}{r^2} = \frac{\hbar^2 l^*(l^*+1)}{2mr^2}, \tag{253}$$

где l^* определяется уравнением $l^*(l^*+1) = l(l+1) - 2mCe^2/\hbar^2$:

$$l^* = -\frac{1}{2} \pm \sqrt{(l+\frac{1}{2})^2 - \frac{2mCe^2}{\hbar^2}}. \tag{254}$$

В результате радиальное волновое уравнение имеет вид:

$$\frac{\partial^2 R(r)}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial R(r)}{\partial r} + \left(\frac{2mE}{\hbar^2} + \frac{2me^2}{\hbar^2 r} - \frac{l^*(l^*+1)}{r^2}\right) R(r) = 0. \tag{255}$$

В результате энергетические уровни атомов щелочных металлов должны определяться формулой:

$$E_{n,l} = -\frac{me^4}{2\hbar^2(n_r + l^* + 1)^2} = -\frac{me^4}{2\hbar^2(n + \Delta_l)^2} = -\frac{2\pi\hbar cR}{(n + \Delta_l)^2}. \qquad (256)$$

где $\Delta = l^* - l$ ридберговская поправка (квантовый дефект), зависящая от l. Таким уровням энергии в атомах щелочных металлов соответствуют спектральные термы:

$$T = \frac{R}{(n + \Delta_l)^2}, \quad R = \frac{me^4}{4c\pi\hbar^3}. \qquad (257)$$

Такой вид термов для щелочных металлов был эмпирически установлен Ридбергом в конце XIX века. Эти термы имеют водородоподобный вид. Они отличаются от водородных термов поправкой Δ_l, а R есть постоянная Ридберга. Зависимость энергии электрона от орбитального квантового числа l является принципиальным отличием уровней энергии атомов щелочных металлов от уровней энергии атома водорода. В данном случае снимается вырождение по l. Это связано с тем, что электрическое поле остова уже не кулоновское.

Излучение происходит в результате перехода внешнего электрона с одного уровня на другой. Возможны лишь такие переходы, при которых квантовое число l внешнего электрона меняется на единицу: $\Delta l = \pm 1$. В спектрах атомов щелочных металлов наблюдаются следующие серии:

главная: переход $2s - np$, n=2, 3, 4, ...

резкая: переход $2p - ns$, n=3, 4, 5, ...

диффузная: переход $2p - nd$, n=3, 4, 5, ...

Спектральная линия соответствующая переходу $2s - 2p$ является самой интенсивной. Эту линию называют резонансной.

8.2. Примеры решения задач

Задача 1. *Выписать спектральные обозначения термов электрона в атоме водорода для n=3.*

Решение:

Если главное квантовое число $n = 3$, то орбитальный момент электрона в атоме водорода принимает значения $l = 0, 1, ..., n - 1$, то есть в данном

случае $l = 0(s)$, $l = 1(p)$, $l = 2(d)$. В соответствии с теоремой сложения спинового и орбитального моментов полный момент импульса электрона принимает значения $j = |l - s| \div |l + s|$. Поскольку $s = 1/2$, возможны следующие значения момента импульса: $j = \frac{1}{2}$ $(l = 0)$; $j = \frac{1}{2}$ $(l = 1)$, $j = \frac{3}{2}$ $(l = 1)$; $j = \frac{3}{2}$ $(l = 2)$; $j = \frac{5}{2}$ $(l = 2)$. Таким образом, в данном случае возможны 5 спектральных термов:

$$3s_{1/2}, \quad 3p_{1/2}, \quad 3p_{3/2}, \quad 3d_{3/2}, \quad 3d_{5/2}.$$

Задача 2. *Выяснить, у атома какого элемента заполнены K, L, M оболочки, $4s$ подоболочка и на треть $4p$ -подоболочка.*

Решение:

Решение этого вопроса сводится к нахождению атомного номера Z, который равен числу электронов в атоме. Чтобы его найти учтем, что в каждой полностью заполненной оболочке могут находиться $2n^2$ электронов. Следовательно, в заполненных оболочка содержится соответственно 2 (K-оболочка), 8 (L-оболочка), 18 (M-оболочка) электронов, всего 28 электронов в заполненных K, L, M - оболочках. В $4s$ - подоболочке находится 2 электрона, так как она тоже заполнена полностью. $4p$ подоболочка заполнена на треть, то есть в ней имеется еще 2 электрона (общее число мест на $4p$ - подоболочке равно $2(2l + 1) = 6$. Таким образом, полное число электронов в атоме равно: 28+2+2=32. Это и есть порядковый номер атома германия Ge в периодической системе элементов.

Задача 3. *Выписать электронные конфигурации и с помощью правила Хунда найти основной терм атомов углерода C и азота N. Электронные конфигурации этих атомов соответствуют застройке электронных оболочек в нормальном порядке.*

Решение:

При заданном значении l состояния частицы в порядке возрастания ее энергии принято нумеровать главным квантовым числом n, принимающим значения $l+1$, $l+2$,... . Надо отметить, что последовательность возрастания уровней энергии у сложных атомов иная, чем у водорода. У водорода E

зависит только от n и не зависит от l, причем всегда $E_{n+1} > E_n$. У сложных атомов часто имеет место другая последовательность уровней - энергия электрона в состоянии n, l+2 больше, чем в состоянии n+1, l. Как правило, энергия электрона тем больше, чем больше сумма $n + l$.

Орбитальное квантовое число: l=1, 2, 3..., определяет зависимость волновой функции от углов θ, ϕ: $l = 0$, s-орбиталь (sharp), $l = 1$, p-орбиталь (principal), $l = 2$ d-орбиталь (diffuse), $l = 3$ f-орбиталь (fundamental), а далее орбитали обозначаются соответственно g- h- и т.д. При этом состояние электрона принято указывать в виде главного квантового числа и буквы, соответствующей орбитальному квантовому числу, например: $1s$, $3d$, $4f$.

О распределении электронов в атоме по состояниям с различными значениями n, l говорят как об электронной конфигурации. Задание электронной конфигурации, таким образом, требует перечисления значений n, l для всех электронов атома. Если имеется несколько электронов с одинаковыми значениями n, l, то это обозначают как $(nl)^k$, например, $(3s)^2$, $(3p)^3$ и т.д. или просто $3s^2$, $3p^3$

Для частицы с отличным от нуля спином состояния с одинаковыми значениями E, l, m_l могут отличаться еще значениями z-компоненты спина m_s. Полная характеристика состояний электрона осуществляется заданием четырех чисел n, l, m_l, m_s, причем энергия определяется лишь первыми двумя. Всего имеется $2(2l+1)$ состояние с одинаковыми значениями n, l, но различными m_l, m_s. Состояния с одинаковыми значениями n, l называются эквивалентными. Обычно говорят об эквивалентных электронах, подразумевая электроны, находящиеся в эквивалентных состояниях. Согласно принципу Паули в каждом n, l, m_l, m_s состоянии не может находиться больше, чем один электрон. Таким образом, в атоме могут иметь одинаковые значения n, l не более $2(2l + 1)$ электронов. Совокупность $2(2l + 1)$ эквивалентных электронов называется замкнутой или заполненной оболочкой.

l	Оболочка	Число заполнения $N = 2(2l + 1)$
0	s-оболочка	2
1	p-оболочка	6
2	d-оболочка	10
3	f-оболочка	14

Иногда пользуются несколько другим определением оболочек: n 1 K-оболочка (состояния 1s), n=2 L-оболочка (состояния 2s, 2p), n 3 M-

оболочка (состояния 3s, 3p, 3d). Оболочки с n=4,5,6 обозначаются N, O, P.

В приближении центрального поля энергия атома полностью определяется заданием электронной конфигурации, т.е. заданием значений n, l для всех электронов. Каждой электронной конфигурации $n_1, l_1, n_2, l_2, \ldots$ соответствуют $2(2l_1+1), 2(2l_2+1), \ldots$ состояний, отличающихся значениями квантовых чисел m_l, m_s, то есть взаимной ориентацией орбитальных моментов и спинов электронов. Отнесение всех этих состояний к одному и тому же энергетическому уровню атома возможно до тех пор, пока мы пренебрегаем той частью электростатического взаимодействия между электронами, которая не учитывается в приближении центрального поля, а также спин-орбитальным взаимодействием. Энергия взаимодействия электронов с ядром и энергия взаимодействия электронов друг с другом имеют разные знаки, поэтому электростатические взаимодействия электронов приводят к сдвигу уровней энергии вверх. Эмпирически было установлено, что для основных конфигураций, содержащих эквивалентные электроны, электростатическое расщепление подчиняется правилам Хунда:

1) Наименьшей энергией обладает уровень с наибольшим возможным для данной электронной конфигурации значением S и наибольшим (возможным при данном S) значении L.

2) Для основного (нормального) уровня $J = |L - S|$, если подоболочка заполнена менее чем на половину, и $J = L + S$ в остальных случаях.

Уровни энергии, соответствующие определенным значениям L, S, называются спектральными термами, или просто термами. Для обозначения термов обычно используются заглавные буквы латинского алфавита:

Орбитальный момент L	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Обозначение терма	S	P	D	F	G	H	I	K	L	M	N

Рассмотрим заполнение электронных оболочек атома углерода, который имеет 6 электронов. На уровне с n=1 могут находиться 2 электрона с нулевым орбитальным моментом, имеющие противоположную ориентацию спинов. Уровень с n=2 включает электроны в состояниях с l=0 и l=1. Число электронов, заполняющих этот уровень равно 2+6=8. Следовательно, этот уровень будет заполнен не полностью. Два электрона будут находиться в состоянии с n 2, l 0, и оставшиеся два электрона находятся в состоянии с n 2, l 1. При этом для основного состояния атома углерода в соответствии с правилами Хунда последние два электрона имеют полный спин

равный 1. Подоболочка с l=1 заполнена менее чем на половину, поэтому полный момент электронов равен J=0. Следовательно, для атома углерода электронная конфигурация имеет вид: $1s^2, 2s^2, 2p^2$, а основной терм - $^3P_0$.

Аналогично, для атома азота получим: $1s^2 2s^2 2p^3 (^4S_{3/2})$.

Задача 4. *Найти возможные типы термов атома, электронная конфигурация незаполненной подоболочки которого:*

a) np^2; *b)* nd^2

Решение:

Из условия задачи в пункте а) на незаполненной подоболочке находятся два электрона, каждый из которых имеет орбитальный момент l=1. Все возможные термы можно получить на основании общего квантовомеханического правила сложения моментов. При сложении орбитальных моментов электронов величина результирующего орбитального момента может принимать три значения: L=0, 1, 2, поэтому возможны три терма S, P, D. Составим таблицу возможных распределений электронов по квантовым состояниям (числам) с учетом принципа Паули.

m_l	m_s	M_L	M_S
0,0	1/2,-1/2	0	0
1,0	1/2,1/2		1
0,1	-1/2,-1/2	1	-1
	1/2,-1/2		0
	-1/2,1/2		0
-1,0	1/2,1/2		1
0,-1	-1/2,-1/2	-1	-1
	1/2,-1/2		0
	-1/2,1/2		0
-1,1	1/2,1/2	0	1
	-1/2,-1/2		-1
	1/2,-1/2		0
	-1/2,1/2		0
1,1	1/2,-1/2	2	0
-1,-1	1/2,-1/2	-2	0

Из этой таблицы следует, что в случае орбитального момента $L = 0, 2$ (S, D- состояния) полный спин системы $S = 0$. При $L = 1$ полный спин системы двух эквивалентных электронов $S = 1$. Поэтому возможны следующие типы термов: ^1S, ^1D, ^3P.

Аналогичные рассуждения в случае электронной конфигурации nd^2 дают: ^1S, ^1D, ^1G, ^3P, ^3F.

8.3. Задачи для самостоятельного решения

1. Найти значения полных механических моментов электронных оболочек атомов в состояниях ^4P, ^5D.

2. Атом находится в состоянии ^4F, имея при этом максимально возможный полный механический момент. Определить кратность вырождения этого состояния по J. Каков физический смысл полученной величины?

3. Найдите число электронов в атомах, у которых заполнены:

   а) K, L - оболочки, $3s$ - подоболочка и наполовину $3p$ - подоболочка.

   б) K, L, M - оболочки, $4s$, $4p$, $4d$ - подоболочки. Какие это атомы?

4. Используя правила Хунда, найти основной терм атома, электронная конфигурация незаполненной подоболочки которого: nd^2, nd^3.

5. Найти кратность вырождения основного состояния атома, электронная конфигурация незаполненной подоболочки которого nd^6

6. Выписать возможные термы атомов, содержащих кроме заполненных оболочек:

   a) два электрона, s и p;

   b) два электрона, p и d.

7. Единственная частично заполненная оболочка некоторого атома содержит три электрона. При этом основному терму атома соответствует $L = 3$. Найдите по правилам Хунда спектральный символ основного состояния данного атома.

8. Выписать электронные конфигурации и с помощью правила Хунда найти основной терм атомов серы S и хлора Cl. Электронные конфигурации этих атомов соответствуют застройке электронных оболочек в нормальном порядке.

9. Выписать возможные термы атомов, содержащих кроме заполненных оболочек три электрона s,p,d.

10. Известно, что в P- и D-состояниях двух различных атомов число возможных значений квантового числа J одинаково и равно 3. Определить спиновый механический момент атомов в этих состояниях.

11. Атом марганца в нормальном состоянии имеет одну незамкнутую подоболочку, заполненную ровно на половину пятью электронами. Определить электронную конфигурацию данной подоболочки и основной терм атома.

12. Найти основное состояние атома ванадия, имеющего следующую электронную конфигурацию: оболочка Ar+$3d^3 4s^2$.

13. Воспользовавшись правилами Хунда, найдите число электронов в единственной частично заполненной оболочке атома, основной терм которого

    а) $^3F_2$, б) $^2P_{3/2}$, в) $^6S_{5/2}$.

14. Найти собственные функции и собственные значения оператора проекции спина на ось z $\hat{s}_z$.

15. Потенциал ионизации атома натрия равен $U = 5.14$ В, а длины волн головных линий главной и диффузной серий $\lambda_1 = 589.0$ нм, $\lambda_2 = 813.3$ нм соответственно. Определить квантовые дефекты s, p, d - термов и длину волны головной линии.

16. Рентгеновские термы в первом приближении можно представить в виде $T = R(Z-a)^2/n^2$, R - постоянная Ридберга, Z - порядковый номер атома, a - поправка экранирования, n - главное квантовое число удаленного электрона. Вычислить поправку a для K, L - термов титана, длина волны края K полосы поглощения, которого $\lambda_K = 249$ пм.

17. Получить собственные функции операторов $\mathbf{S}^2$ и S_z для системы трех частиц, обладающих спином 1/2.

18. При облучении атомов криптона рентгеновским излучением с длиной волны λ обнаружено, что в некоторых случаях из атомов вылетает по два электрона: фотоэлектрон, освобождаемый с K - оболочки, и электрон, освобождаемый в результате эффекта Оже с L - оболочки. Энергия связи K- и L электронов соответственно равна 14.4 и 2.0 кэВ. Вычислить:

а) Кинетическую энергию обоих электронов, если $\lambda = 65$ пм.

б) Длину волны λ, при которой энергии обоих электронов одинаковы.

Примечание: Оже-эффект - эмиссия электрона из атома, происходящая в результате безизлучательного перехода при наличии в атоме вакансии на внутренней электронной оболочке. Эффект обнаружен П. Оже в 1925 г. Оже процесс можно разделить на две стадии. Первая ионизация атома внешним излучением (рентгеновским, быстрыми электронами, ионами) с образованием вакансии на одной из внутренних оболочек. Такое состояние атома неустойчиво, и на второй стадии происходит заполнение вакансии электроном одного из вышележащих уровней энергии атома. Выделяющаяся при этом энергия может быть испущена в виде кванта характеристического рентгеновского излучения, но может быть передана третьему атомному электрону , который в результате вылетает из атома, то есть происходит Оже-эффект.

19. Рассмотреть сверхтонкую структуру S-уровней водородоподобного атома, связанную с взаимодействием магнитных моментов электрона и ядра. Ядро имеет спин I и магнитный момент μ_0, так что для него $\hat{\boldsymbol{\mu}} = \mu_0 \hat{\mathbf{I}}/I$ (и рассматривается как точечная частица). Учесть, что магнитный момент ядра $\boldsymbol{\mu}$ создает магнитное поле, векторный потенциал которого равен

$$\mathbf{A} = rot \frac{\boldsymbol{\mu}}{r} = \frac{[\boldsymbol{\mu} \times r]}{r^3}. \tag{258}$$

20. Учитывая, что оператор спин-орбитального взаимодействия электрона в атоме водорода равен

$$\Delta H_{ls} = \frac{Ze^2}{2m_e^2 c^2 r^3} (\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}), \tag{259}$$

найти его вклад в тонкую структуру спектра по теории возмущений. Получить формулу тонкой структуры:

$$E_{nj} = E_n^0 \left[1 + \frac{(Z\alpha)^2}{n} \left(\frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \right] \tag{260}$$

Показать на диаграмме расщепление спектральных линий с $n = 1, 2, 3$, происходящее в соответствии с этой формулой.

8.4. Биографическое примечание

- **Паули**, Вольфганг (25.04.1900-15.12.1958), выдающийся немецкий физик-теоретик. Внес существенный вклад в развитие квантовой теории, сформулировал принцип запрета (Нобелевская премия 1945 г.). Развил идеи матричной механики Гейзенберга. Ввел спиноры для описания спина электрона. Постулировал существование нейтрино.

- **Хунд**, Фридрих (04.02.1896-31.03.1997), немецкий физик. Основные труды по квантовой механике, спектроскопии (систематика атомных и молекулярных спектров), магнетизму и истории физики. В 1925 году он установил эмпирические правила в атомной физике, позволяющие описать состояния электронных конфигураций атомов.

- **Оже**, Пьер Виктор (14.05.1899-25.12.1993), французский физик. С 1941 по 1945 год занимался научными исследованиями в Великобритании, Канаде и Соединённых Штатах. Открыл автоионизацию возбуждённого атома (1925, эффект Оже), широкие атмосферные ливни в космических лучах (1938).

9. АТОМ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ. ОПЫТЫ ЭЙНШТЕЙНА-ДЕ ГААЗА, ШТЕРНА-ГЕРЛАХА. ЭФФЕКТ ЗЕЕМАНА

9.1. Магнитные свойства атома. Краткая теория

Рассмотим уравнение Шредингера для электрона, движущегося в статическом электрическом поле и статическом однородном магнитном поле:

$$\left[\frac{1}{2m}\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\hat{\mathbf{A}}\right)^2 + e\Phi\right]\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}. \tag{261}$$

Преобразуем гамильтониан, учитывая калибровочное условие $div\mathbf{A} = 0$ и выбирая $A_x = -\frac{1}{2}yH$, $A_y = \frac{1}{2}xH$, $A_z = 0$. Тогда в случае кулоновского центрального поля получим:

$$\left[\Delta + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{e_0 H}{2mv}L_z + \frac{Ze_0^2}{r}\right)\right]\psi(\mathbf{r}) = 0. \tag{262}$$

Дополнительная энергия электрона в магнитном поле определяется слагаемым $\Delta U = -(\boldsymbol{\mu}\ \mathbf{H}) = \frac{e_0\hbar}{2mc}HL_z$. Следовательно, магнитный момент

электрона связан с орбитальным механическим моментом $\mathbf{L}$ следующей формулой:

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{e}{2mc}\mathbf{L}. \tag{263}$$

В 1915 году в опытах Эйнштейна-де Гааза была выполнена экспериментальная проверка этого соотношения. Внутри проволочной катушки по ее оси на тонкой кварцевой нити подвешивался образец (парамагнетик или ферромагнетик) цилиндр, который может перемагничиваться под влиянием продольного магнитного поля, создаваемого током, текущим через соленоид. Если изменить направление тока, то стержень должен перемагнититься, что приведет к изменению механического момента, и нить закрутится на определенный угол. По углу закручивания нити, зная ее упругие свойства, можно определить отношение магнитного момента образца и механического момента - гиромагнитное отношение: $\frac{\mu_z}{L_z} = -g\frac{e_0}{2mc}$, e_0 модуль электрического заряда электрона. Множитель g вначале (Эйнштейном и де Гаазом) был найден равным 1, а затем Стюартом и Барнеттом было показано, что $g = 2$ вопреки теории Шредингера.

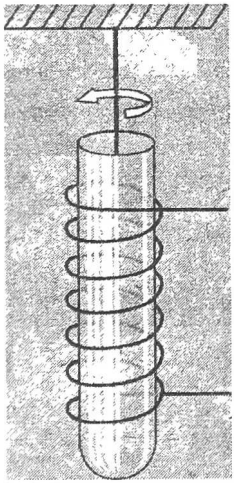

Рис. 27. Опыт Эйнштейна-де Гааза.

В другом опыте Штерна-Герлаха в 1921 г. изучалось поведение атомов серебра в неоднородном магнитном поле. На магнитный момент атома в

неоднородном магнитном поле направленном по оси z действует сила

$$F_z = \mu_z \frac{\partial H_z}{\partial z}. \tag{264}$$

Если проекция магнитного момента на ось z принимает дискретный набор значений, то произойдет расщепление пучка атомов на несколько компонент, соответствующих проекциям момента на ось z. Штерн и Герлах наблюдали расщепление пучка атомов серебра ($l = 0$) на две компоненты. Это свидетельствовало о наличии у атомов еще какого-то момента импульса равного $1/2$. В 1925 г. Дж. Уленбек и С. Гаудсмит пришли к выводу о наличии у электрона собственного механического момента, равного $\hbar/2$ и назвали его спином.

Атомный электрон, движущийся в магнитном поле $\mathbf{H}$, приобретает дополнительную энергию при учете спинового о орбитального моментов следующего вида:

$$\Delta H = -(\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{H}) = \frac{e}{2mc}(\mathbf{L} + 2\mathbf{S})\mathbf{H}. \tag{265}$$

Введем оператор полного момента импульса электрона $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$. Чтобы получить вклад гамильтониана ΔH в спектр энергии по теории возмущений $< njlm_j|\hat{\mu}_z|njlm_j >$ установим связь оператора полного магнитного момента $\hat{\boldsymbol{\mu}}$ и оператора полного механического момента с помощью оператора $\hat{G}$:

$$\hat{\boldsymbol{\mu}} = \hat{G} \cdot \mathbf{J} = \frac{e}{2mc}(\mathbf{J} + \mathbf{S}). \tag{266}$$

Чтобы определить вид оператора $\hat{G}$ умножим последнее равенство скалярно на $\mathbf{J}$:

$$\hat{G} \cdot \mathbf{J}^2 = \frac{e}{2mc}\mathbf{J}^2 \left(1 + \frac{\mathbf{J} \cdot \mathbf{S}}{\mathbf{J}^2}\right)$$

Отсюда окончательно получаем, что

$$\hat{G} = \frac{e}{2mc}\left(1 + \frac{\mathbf{J} \cdot \mathbf{S}}{\mathbf{J}^2}\right) = \frac{e}{2mc}\left(1 + \frac{\mathbf{J}^2 + \mathbf{S}^2 - \mathbf{L}^2}{2\mathbf{J}^2}\right) \tag{267}$$

Тогда результат усреднения исходного взаимодействия ΔH по волновым функциям ψ_{njlm_j} представим в виде:

$$\Delta E_{njlm_j} = -(\psi_{njlm_j}, H \cdot \mu_z \psi_{njlm_j}) = -\frac{e\hbar H}{2mc} g(\psi_{njlm_j}, \hat{J}_z \psi_{njlm_j}) = -\frac{e\hbar H}{2mc} g m_j, \tag{268}$$

где m_j-собственное значение оператора проекции полного момента на ось z, множитель Ланде

$$g = 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)}. \qquad (269)$$

Расщепление спектральных линий атома, которое определяется этой формулой называется аномальным эффектом Зеемана. Оно проиллюстрировано на рис.23 и использование этой формулы обсуждается в теме 10.

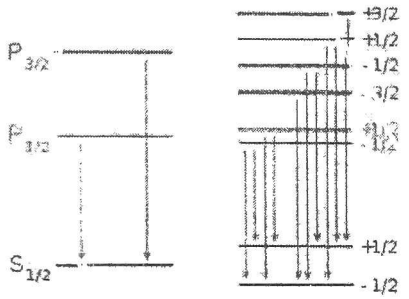

Рис. 28. Расщепление спектральных линий атома в магнитном поле.

Рассмотрим некоторые экзотические случаи для фактора Ланде:

1) В состоянии $^3P_0$ $g = 0/0$. Эта неопределенность не должна смущать, поскольку при $J = 0$ механический момент равен 0, а значит отсутствует и магнитный момент.

2) В состоянии $^4D_{1/2}$ $g = 0$, то есть механический момент есть, а магнитный момент отсутствует.

3) В состоянии $^6F_{1/2}$ $g = -2/3$, а это значит, что в данном состоянии знак минус между механическим и магнитным моментом исчезает. На классическом языке это означает, что векторы механического и магнитного моментов сонаправлены.

4) В состоянии $^5P_1$ $g = 5/2$, то есть фактор Ланде в некоторых состояниях может быть больше двух.

9.2. Примеры решения задач

Задача 1. *Максимальное значение проекции магнитного момента атома в состоянии D_2 равно четырем магнетонам Бора. Определить*

мультиплетность этого состояния.

Решение:

Используем формулу для проекции магнитного момента на ось z: $\mu_z = -\mu_B g m_j$. Из нее получим, учитывая, что максимальное значение проекции магнитного момента равно $j = 2$:

$$\mu_{z\ max} = 4\mu_B = gj\mu_B.$$

Следовательно, $g = 2$. Имея ввиду, что $j = 2$ $l = 2$, найдем из формулы для гиромагнитного фактора Ланде значение спина:

$$S^2 + S - 12 = 0, \quad S = 3.$$

Тогда фактор мультиплетности $(2S + 1) = 7$.

Задача 2. *Убедиться, что магнитные моменты атомов в состояниях* $^4D_{1/2}$ *и* $^6G_{3/2}$ *равны нулю. Интерпретировать этот факт на основе векторной модели.*

Решение:

Для расчета магнитных моментов атомов в данных состояниях будем использовать следующую формулу:

$$\mu = g\sqrt{J(J+1)}\mu_B, \quad g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}, \qquad (270)$$

где μ_B- магнетон Бора, g- множитель Ланде. Так в случае состояния $^4D_{1/2}$ S=3/2, J=1/2, L=2, что приводит к нулевому фактору Ланде и нулевому магнитному моменту. С точки зрения векторной модели это означает, что векторы $\boldsymbol{\mu}$ и $\mathbf{J}$ ортогональны. Такие же рассуждения справедливы для состояния $^6G_{3/2}$.

Задача 3. *Показать с помощью векторной модели и соотношения* $\frac{d\mathbf{J}}{dt} = \mathbf{M}$, *где* $\mathbf{J}$*-момент количества движения атома и* $\mathbf{M}$*-механический*

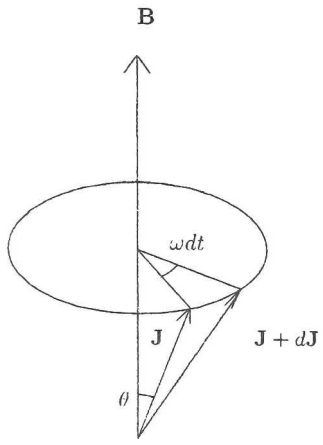

Рис. 29. Прецессия вектора полного момента J в магнитном поле B.

момент внешних сил, что угловая скорость прецессии вектора $\mathbf{J}$ *в магнитном поле* B *равна* $\omega = g\mu_B B/\hbar$, *g- множитель Ланде.*

Решение:

Пусть J -момент количества движения атома, μ- соответствующий ему магнитный момент, который возникает при движении электрона вокруг ядра. Будем рассматривать атом, как замкнутый контур с током I. На элемент этого контура в магнитном поле $\mathbf{B}$ действует сила Ампера:

$$d\mathbf{F} = \frac{1}{c} I[d\mathbf{r} \times \mathbf{B}], \tag{271}$$

которой соответствует механический момент

$$d\mathbf{M} = [\mathbf{r} \times d\mathbf{F}] = \frac{I}{c}[\mathbf{r} \times [d\mathbf{r} \times \mathbf{B}]]. \tag{272}$$

Тогда полный момент вращения, действующий на контур с током, равен:

$$\mathbf{M} = \frac{I}{c}\oint [\mathbf{r} \times [d\mathbf{r} \times \mathbf{B}]] = \frac{I}{c}\oint (\mathbf{rB})d\mathbf{r} - \frac{I}{c}\oint \mathbf{B}(\mathbf{r}d\mathbf{r}). \tag{273}$$

Если поле $\mathbf{B}$ постоянно в пределах контура, то второй интеграл равен нулю. Заменяя далее

$$(\mathbf{rB})d\mathbf{r} = \frac{1}{2}[[\mathbf{r} \times d\mathbf{r}] \times \mathbf{B}] + \frac{1}{2}d((\mathbf{rB})\mathbf{r}),$$

и учитывая, что второе слагаемое обращается в нуль при интегрировании по контуру, мы получаем, что

$$\mathbf{M} = [\boldsymbol{\mu} \times \mathbf{B}], \quad \boldsymbol{\mu} = \frac{I}{2c} \oint [\mathbf{r} \times d\mathbf{r}]. \tag{274}$$

Таким образом, уравнение движения момента $\mathbf{J}$ принимает вид:

$$\dot{\mathbf{J}} = [\boldsymbol{\mu} \times \mathbf{B}] = -g \frac{\mu_B}{\hbar} [\mathbf{J} \times \mathbf{B}]. \tag{275}$$

Здесь мы ввели специальный коэффициент - так называемый фактор Ланде g, как коэффициент пропорциональности между проекцией магнитного момента на направление полного момента $\mathbf{J}$ и величиной полного момента. В скалярной форме система трех уравнений движения полного момента $\mathbf{J}$ имеет вид:

$$\dot{J}_x = -\omega J_y, \quad \dot{J}_y = \omega J_x, \quad \dot{J}_z = 0. \tag{276}$$

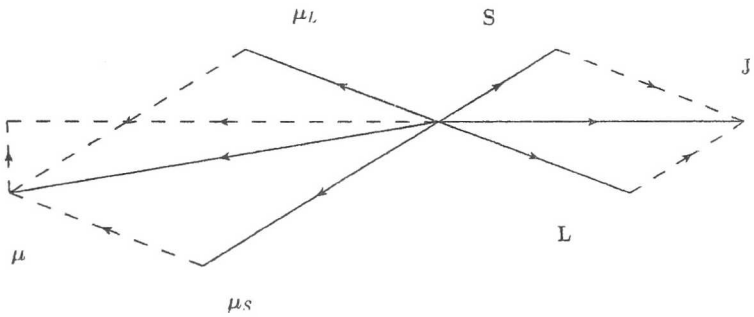

Рис. 30. Диаграмма сложения моментов.

Проекция полного момента на направление магнитного поля остается постоянной, а $J_x + iJ_y = A \cdot e^{i\omega t}$, $J_x = A\cos\omega t$, $J_y = A\sin\omega t$, где угловая скорость прецессии $\omega = g \cdot e \cdot B/2mc$. Прецессия полного момента проиллюстрирована на рис.24. Конкретное выражение для фактора Ланде через значения j, l, s можно получить, используя векторную модель сложения моментов, показанную на рис.25. Для этого заметим, что

$$\boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{\mu}_L \cdot \cos(\widehat{\mathbf{L} \cdot \mathbf{J}}) + \boldsymbol{\mu}_S \cdot \cos(\widehat{\mathbf{S} \cdot \mathbf{J}}) = \mu_B [\mathbf{L} \cdot \cos(\widehat{\mathbf{L} \cdot \mathbf{J}}) + 2\mathbf{S} \cdot \cos(\widehat{\mathbf{S} \cdot \mathbf{J}}).$$

Выражения для косинусов можно получить из определения $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$:

$$\cos(\widehat{\mathbf{L} \cdot \mathbf{J}}) = \frac{J^2 + L^2 - S^2}{2LJ}, \quad \cos(\widehat{\mathbf{S} \cdot \mathbf{J}}) = \frac{J^2 + S^2 - L^2}{2JS}. \tag{277}$$

Задача 4. *Найти нормированные соответствующим образом волновые функции стационарных состояний и уровни энергии заряженной бесспиновой частицы в однородном магнитном поле, векторный потенциал которого имеет вид:* $A_x = -yH_0$, $A_y = A_z = 0$.

Решение:

Оператор Гамильтона, описывающий движение заряженной частицы в магнитном поле равен:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 = \frac{1}{2m}\left[\hat{p}_x^2 + \left(\hat{p}_y - \frac{e}{c}xH_0\right)^2 + \hat{p}_z^2\right]. \qquad (278)$$

Из вида этого гамильтониана следует, что операторы прокции импульса на оси y, z коммутируют с ним и между собой: $[\hat{p}_y, \hat{p}_z] = 0$, $[\hat{p}_z, H] = 0$, $[\hat{p}_y, H] = 0$. Поэтому, как обсуждалось ранее в теме 5, эти операторы одновременно измеримы. Зная собственные функции операторов проекции импульса на оси y, z, мы можем искать решение уравнения Шредингера нашей задачи в виде:

$$\psi_{E,p_y,p_z}(x,y,z) = \frac{1}{2\pi\hbar}e^{\frac{i}{\hbar}p_y y}e^{\frac{i}{\hbar}p_z z}\psi(x). \qquad (279)$$

где p_y, p_z собственные значения операторов проекции импульса на оси y, z. Для неизвестной функции $\psi(x)$ получим следующее уравнение после подстановки $\psi_{E,p_y,p_z}(x,y,z)$ в исходное уравнение Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + \frac{1}{2m}\left(p_y - \frac{eH_0x}{c}\right)^2\psi(x) = E_t\psi(x), \quad E_t = E - \frac{p_x^2}{2m}. \qquad (280)$$

Данное уравнение представляет собой известное уравнение для линейного гармонического осциллятора. Поэтому искомые волновые функции частицы в однородном магнитном поле и уровни энергии мы можем сразу записать, используя результаты решения уравнения Шредингера для осциллятора:

$$\psi_{n,p_y,p_z}(x,y,z) = \frac{1}{2\pi\hbar}e^{\frac{i}{\hbar}p_y y}e^{\frac{i}{\hbar}p_z z}\psi_n^{\text{осц}}\left(x - \frac{cp_y}{eH_0}\right), \qquad (281)$$

$$F_{np_z} = \frac{|e|\hbar H_0}{mc}\left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{p_z^2}{2m}, \quad n = 0,1,2,\ldots$$

Из последней формулы для уровней энергии непосредственно следует, что энергетические уровни поперечного движения (в плоскости перпендикулярной направлению магнитного поля) частицы являются дискретными. Кратность их вырождения равна бесконечности, так как энергия не зависит от величины p_y: $-\infty < p_y < \infty$.

9.3. Задачи для самостоятельного решения

1. На сколько компонентов расщепится в опыте Штерна-Герлаха пучок атомов, находящихся в состоянии $^2D_{3/2}$?

2. Вычислить множитель Ланде для атомов:

   а) с одним валентным электроном в состояниях S, P, D;

   б) в состоянии ^3P;

   в) в S-состояниях;

   г) в синглетных состояниях.

3. Выписать спектральные обозначения терма, у которого:

   а) $S = \frac{1}{2}$, $J = \frac{5}{2}$, $g = \frac{6}{7}$;

   б) $S = 1$, $L = 2$, $g = \frac{4}{3}$.

   Ответ: а) $^2F_{5/2}$, б) $^3D_3$.

4. Найти магнитный момент μ и возможные значения проекции магнитного момента атома в состоянии:

   а) ^1F, б)$^2D_{3/2}$.

5. Максимальное значение проекции магнитного момента атома, находящегося в состоянии D_2, равно четырем магнетонам Бора. Определить мультиплетность этого терма.

6. Найти угловые скорости прецессии механических моментов атома в магнитном поле B=1000 Гс, если атом находится:

   а) в состоянии ^1P, $^2P_{3/2}$, $^5F_1$;

   б) в основном состоянии, электронная конфигурация незаполненной подоболочки которого np^4 (использовать правило Хунда).

7. Имея в виду, что отношение магнитного момента к механическому для спинового момента вдвое больше, чем для орбитального, получить с помощью векторной модели формулу:

$$\mu = g\sqrt{J(J+1)}\mu_B, \quad g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}, \quad (282)$$

где μ-магнитный момент атома, μ_B- магнетон Бора, g-множитель Ланде.

8. Чему равен модуль магнитного момента атома, состояние которого определено квантовыми числами $L = 2$, $J = 3/2$, $S = 1/2$?

9. На сколько компонент расщепится в опыте Штерна-Герлаха пучок атомов, находящихся в состоянии $^2D_{3/2}$?

10. Атом в состоянии $^2P_{\frac{1}{2}}$ находится на оси кругового контура с током I 10.0 А. Расстояние между атомом и центром контура с током z=5.0 см, радиус контура R=5.0 см. Вычислить максимальное значение силы взаимодействия между атомом и этим током.

11. В опыте Штерна и Герлаха узкий пучок атомов серебра (в нормальном состоянии) проходит через поперечное резко неоднородное магнитное поле и попадает на экран. При каком значении градиента напряженности магнитного поля расщепление пучка на экране δ=2.0 мм, если a=10 см, b=20 см и скорость атомов v=300 м/с.

12. Узкий пучок атомов пропускают по методу Штерна-Герлаха через резко неоднородное магнитное поле. Определить:

    а) максимальные значения проекций магнитных моментов атомов в состояниях ^4F, ^6S, ^5D, если известно, что пучок расщепляется соответсьвенно на 4, 6, 9 компонент.

    b) на сколько компонент расщепится пучок атомов, находящихся в состояниях $^3D_2$, $^5F_1$.

13. В одном из опытов по расщеплению узкого атомарного пучка по методу Штерна и Герлаха использовали атомы ванадия в основном состоянии $^4F_{3/2}$. Найти расстояние между крайними компонентамипучка на экране, если a=10 см, b=20 см, $\partial B/\partial z$=23 кГс/см и кинетическая энергия атомов T=0.04 эВ.

14. Убедитесь, что магнитные моменты атомов в состояниях $^4D_{1/2}$, $^6G_{3/2}$ равны нулю. Интерпретируйте этот факт на основе векторной модели атома.

15. Для атома кислорода, находящегося в основном состоянии найти модули магнитных моментов, обусловленных движением электронов: орбитальным, спиновым, суммарным механическим.

16. С какой угловой скоростью будет вращаться состоящий из N атомов цилиндр, момент инерции которого I, подвешенный в магнитном поле с напряженностью $\mathbf{H}$ параллельной оси цилиндра, после изменения направления магнитного поля на противоположное. Считать, что цилиндр намагничивается до насыщения. Орбитальный момент импульса электрона в атоме равен l.

9.4. Биографическое примечание

- **Штерн**, Отто (17.02.1888-17.08.1969), немецкий физик. Выдающийся экспериментатором. Развил метод молекулярных пучков, открыл спин, измерил атомные магнитные моменты. Изучал волновую природу атомов и молекул, открыл магнитный момент протона. Стал лауреатом Нобелевской премии по физике в 1943 году.

- **Герлах**, Вальтер (01.08.1889-10.08.1979), немецкий физик. Автор открытия спина и пространственного квантования направления магнитных моментов атомов.

- **Зееман**, Питер (25.05.1985-19.10.1943), нидерландский физик. Исследовал воздействие магнитного поля на спектральные линии источника излучения, открыл эффект, известный теперь под названием эффекта Зеемана. Нобелевской премии по физике в 1902 г. Экспериментально доказал равенство инертной и гравитационной масс. Определил удельный электрический заряд. Исследовал броуновское движение.

10. АТОМ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ. ЭФФЕКТ ЗЕЕМАНА. МАГНИТНЫЙ РЕЗОНАНС

10.1. Квантование полного момента импульса электрона. Магнитный резонанс. Краткая теория

Оператором полного момента электрона $\mathbf{J}$ называется оператор равный сумме операторов орбитального и спинового моментов:

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}. \tag{283}$$

Для него выполняются такие же коммутационные соотношения, что и для оператора орбитального момента и оператора спинового момента:

$$[J_i, J_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}J_k, \quad [\mathbf{J}^2, J_i] = 0. \tag{284}$$

Операторы $\mathbf{J}^2$ и J_z квантуются аналогично орбитальному моменту, но полуцелыми числами:

$$\mathbf{J}^2 = \hbar^2 j(j+1), \quad j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, ...; \quad J_z = \hbar m_j, \quad m_j = \pm\frac{1}{2}, \pm\frac{3}{2}, ... \tag{285}$$

При этом j принимает два значения: $|l-s|$ и $l+s$.

Для доказательства этого утверждения рассмотрим уравнение на собственные значения:

$$\hat{\mathbf{J}}^2\psi = J^2\psi, \quad \psi = \begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix}. \tag{286}$$

Подставляя сюда квадрат полного момента электрона, получим:

$$\mathbf{L}^2\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix} + \frac{3}{4}\hbar^2\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix} + 2\left[L_x\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix} + L_y\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}\right. \tag{287}$$

$$\left. + L_z\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\right]\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix} = J^2\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix}.$$

Выполняя умножение и сложение матриц, мы может представить уравнение на собственные значения в виде системы двух уравнений для ψ_1, ψ_2:

$$\mathbf{L}^2\psi_1 + \frac{3}{4}\hbar^2\psi_1 + \hbar L_z\psi_1 + \hbar(L_x - iL_y)\psi_2 = J^2\psi_1, \tag{288}$$

$$\mathbf{L}^2\psi_2 + \frac{3}{4}\hbar^2\psi_2 - \hbar L_z\psi_2 + \hbar(L_x + iL_y)\psi_1 = J^2\psi_2.$$

Поскольку оператор $(L_x - iL_y)$ - понижающий, а $(L_x + iL_y)$ повышающий, то есть

$$L_- Y_{lm} = -\hbar\sqrt{(l+m)(l-m+1)}Y_{lm-1}, L_+ Y_{lm} = -\hbar\sqrt{(l-m)(l+m+1)}Y_{lm+1}, \tag{289}$$

то решение этой системы можно искать в виде:

$$\psi_1 = aY_{lm}(\theta,\phi), \quad \psi_2 = bY_{lm+1}(\theta,\phi). \tag{290}$$

После подстановки получим систему двух уравнений для определения a, b (введено обозначение $\lambda = J^2/\hbar^2$):

$$[l(l+1) + \frac{3}{4} + m]a - \sqrt{(l+m+1)(l-m)}b = \lambda a,$$

$$[l(l+1) + \frac{3}{4} - m - 1]b - \sqrt{(l+m+1)(l-m)}a = \lambda b.$$

Определитель этой системы должен быть равен нулю:

$$\begin{vmatrix} l(l+1) + \frac{3}{4} + m - \lambda & -\sqrt{(l+m+1)(l-m)} \\ -\sqrt{(l+m+1)(l-m)} & l(l+1) + \frac{3}{4} - m - 1 - \lambda \end{vmatrix} = 0. \tag{291}$$

Отсюда находим два корня $\lambda_{1,2} = (l+\frac{1}{2})^2 \pm (l+\frac{1}{2})$. Таким образом, мы получили два собственных значения: $J^2 = \hbar^2(l+\frac{1}{2})(l+\frac{3}{2})$, $J^2 = \hbar^2(l-\frac{1}{2})(l+\frac{1}{2})$. Если представить $J^2 = \hbar^2 j(j+1)$, то первое значение отвечает $j = l+\frac{1}{2}$, а второе значение $j = l-\frac{1}{2}$. Подставляя $j = (l+\frac{1}{2})$ в систему для a, b, находим связь между ними:

$$b = -\sqrt{\frac{l-m}{l+m+1}}a, \tag{292}$$

а затем из условия нормировки находим значение коэффициента a:

$$a = \sqrt{\frac{l+m+1}{2l+1}}, \quad b = -\sqrt{\frac{l-m}{2l+1}}. \tag{293}$$

Аналогично находится второе решение при $j = l-\frac{1}{2}$. Представим собственные волновые функции, отвечающие двум значениям j в виде:

$$Y_{lm}^{j=l+\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{l+m+1}{2l+1}}Y_{lm} \\ -\sqrt{\frac{l-m}{2l+1}}Y_{lm+1} \end{pmatrix}, \quad Y_{lm}^{j=l-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{l-m}{2l+1}}Y_{lm} \\ \sqrt{\frac{l+m+1}{2l+1}}Y_{lm+1} \end{pmatrix}. \tag{294}$$

Функции Y^j_{lm} называются шаровыми спинорами. Они представляют собой угловую часть решения для любых задач, связанных с движением частицы с полуцелым спином в поле центральных сил. Можно проверить, что они являются и собственными функциями оператора J_z с собственным значением $m_j = m + \frac{1}{2}$, что в итоге дает пределы изменения m_j от $-j$ до j, всего $2j+1$ значение.

Полученное правило квантования операторов $\mathbf{J}^2$, J_z используется для объяснения эффекта Зеемана.

Рассмотрим вопрос о сложении двух моментов количества движения , считая, что система состоит из двух подсистем, так что оператор момента есть векторная сумма операторов, относящихся к подсистемам:

$$\mathbf{J} = \mathbf{j}_1 + \mathbf{j}_2. \tag{295}$$

Если подсистемы не взаимодействуют, то их моменты сохраняются, и состояние каждой подсистемы описывается значением момента $j_{1,2}$ и его проекцией на ось z $m_{1,2}$. Тогда состояние системы в целом задастся вектором

$$\Phi_{j_1 m_1; j_2 m_2} = |j_1 m_1; j_2 m_2>, \tag{296}$$

где остальные характеристики состояния явно не указаны. Пространство состояний с заданными j_1, j_2 имеет размерность $(2j_1)(2j_2)$, а векторы (296) образуют базис в нем. Возможно однако, что из-за взаимодействия моменты $\mathbf{j}_1$ и $\mathbf{j}_2$ по отдельности не сохраняются. Типичный пример даст спин-орбитальное взаимодействие, когда $\mathbf{L}^2$ и $\mathbf{S}^2$ сохраняются, но L_z, S_z не сохряняются. Полный момент $\mathbf{J}$ при этом сохраняется и квантовые числа j, m являются хорошими квантовыми числами. Поэтому необходимо уметь делать преобразование от базиса (295) к базису

$$\Phi^{jm}_{j_1 j_2} = |j_1 j_2; jm> . \tag{297}$$

Эта задача носит название векторного сложения моментов. Нетрудно установить, что полный момент J принимает значения от максимального $J_{max} = j_1 + j_2$ до минимального $J_{min} = |j_1 - j_2|$. Должно существовать унитарное преобразование, $< j_1 m_1; j_2 m_2 | j_1 j_2; jm >$ от одного базиса к другому:

$$|j_1 j_2; jm> = \sum_{m_1 m_2} |j_1 m_1; j_2 m_2 >< j_1 m_1; j_2 m_2 | j_1 j_2; jm > \tag{298}$$

Коэффициенты преобразования

$$< j_1 m_1; j_2 m_2 | j_1 j_2; jm >=< j_1 j_2; jm | j_1 m_1; j_2 m_2 >^* = C^{jm}_{j_1 m_1\ j_2 m_2} \qquad (299)$$

называются коэффициентами Клебша-Гордона (коэффициенты векторного сложения). Принятому условию вещественности матричных элементов момента

$$< j' m' | J_\pm | jm >= \delta_{jj'} \delta_{m'(m\pm 1)} \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \qquad (300)$$

отвечает вещественность коэффициентов Клебша-Гордона, для которых получаются два соотношения ортогональности:

$$\sum_{m_1 m_2} < j_1 j_2; jm | j_1 m_1; j_2 m_2 >< j_1 m_1; j_2 m_2 | j_1 j_2 | j_1 j_2; j' m' >= \qquad (301)$$

$$=< j_1 j_2; jm | j_1 j_2; j' m' >= \delta_{jj'} \delta_{mm'},$$

$$\sum_{jm} < j_1 m_1; j_2 m_2 | j_1 j_2; jm >< j_1 j_2; jm | j_1 m_1'; j_2 m_2' >= \qquad (302)$$

$$=< j_1 m_1; j_2 m_2 | j_1 m_1'; j_2 m_2' >= \delta_{m_1 m_1'} \delta_{m_2 m_2'}.$$

Поэтому обратное преобразование дается той же матрицей коэффициентов:

$$|j_1 m_1; j_2 m_2 >= \sum_{jm} C^{jm}_{j_1 m_1\ j_2 m_2} |j_1 j_2; jm > . \qquad (303)$$

Рассмотрим простейший пример сложения двух моментов $j_1 = j_2 = 1/2$. Базисные спиноры обозначим $\chi_\pm$. Базис (296) состоит из четырех векторов

$$\chi_+(1)\chi_+(2), \quad \chi_-(1)\chi_+(2), \quad \chi_+(1)\chi_-(2), \quad \chi_-(1)\chi_-(2). \qquad (304)$$

Нам необходимо классифицировать состояния по определенному полному спину и его проекции, то есть вычислить коэффициенты Клебша-Гордона. Полный спин системы может принимать значения S= 1 (3 состояния с $S_z = 0, \pm 1$, триплет) и $S = 0$ (одно состояние с $S_z = 0$, синглет). Состояние с максимальным значением спина и его проекции имеет вид:

$$|S = 1, S_z = 1 >= |11 >= \chi_+(1)\chi_+(2), \qquad (305)$$

то есть соответствующий коэффициент Клебша-Гордона можно положить равным 1. Мы принимаем таким образом, что $C^{j_1+j_2\ j_1+j_2}_{j_1 j_1\ j_2 j_2} = 1$. Аналогично имеем для состояния с $S = 1$ и $S_z = -1$:

$$|S = 1, S_z = -1 >= |1 - 1 >= \chi_-(1)\chi_-(2). \qquad (306)$$

Оставшиеся два состояния обладают $S_z = 0$ и поэтому могут принадлежать как к синглету, так и к триплету. Триплетная комбинация $|10>$ получается из $|11>$, действуя на него понижающим оператором S_-:

$$S_-|11> = \sqrt{2}|10> = (s_{1-}\chi_+(1))\chi_+(2) + \chi_+(1)(s_{2-}\chi_+(2)) = \tag{307}$$

$$= \chi_-(1)\chi_+(2) + \chi_+(1)\chi_-(2).$$

Откуда окончательно находим, что

$$|10> = \frac{1}{\sqrt{2}}[\chi_+(1)\chi_-(2) + \chi_-(1)\chi_+(2)], \quad C^{10}_{1/21/2\ 1/2-1/2} = C^{10}_{1/2-1/2\ 1/21/2} = \frac{1}{\sqrt{2}}. \tag{308}$$

Ортогональная синглетная комбинация дастся выражением:

$$|10> = \frac{1}{\sqrt{2}}[\chi_+(1)\chi_-(2) - \chi_-(1)\chi_+(2)], \quad C^{00}_{1/21/2\ 1/2-1/2} = -C^{00}_{1/2-1/2\ 1/21/2} = \frac{1}{\sqrt{2}}. \tag{309}$$

Триплетное состояние симметрично относительно перестановки спиновых координат частиц, а синглетное состояние - антисимметрично.

10.2. Примеры решения задач

Задача 1. *Изобразить схему возможных переходов в слабом магнитном поле и вычислить смещения (в единицах $\mu_B B/\hbar$) зеемановских компонент спектральной линии $^2D_{3/2} \to {}^2P_{3/2}$.*

Решение:

В магнитном поле энергетические уровни $^2D_{3/2}$ и $^2P_{3/2}$ расщепляются на $2j + 1 = 4$ компоненты каждый ($j = 3/2$). Изобразим схему расщепления и возможных переходов в магнитном поле:

Смещения зеемановских компонент определяются основной формулой:

$$\Delta\omega = (m_1 g_1 - m_2 g_2)\frac{\mu_B B}{\hbar}, \tag{310}$$

где m_i, g_i – магнитные квантовые числа и множители Ланде соответствующих термов. Для термов $^2D_{3/2}$ и $^2P_{3/2}$ множители Ланде равны соответственно: $g_1 = 1 + \frac{3/2(3/2+1)+1/2(1/2+1)-2(2+1)}{3(3/2+1)} = 4/5$, $g_2 = 4/3$. Поэтому, например, для перехода без изменения проекции полного момента на ось Z при

$m_J = \frac{3}{2}$ получим $\Delta\omega = -12/15$. Другие смещения зеемановских компонент вычисляются аналогично: $\Delta\omega = \pm(4, 8, 12, 16, 24)/15$.

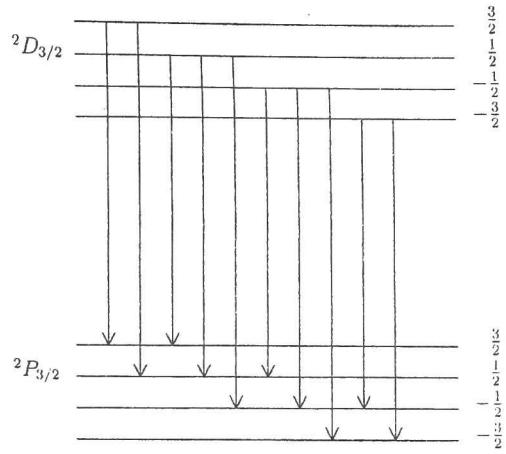

Рис. 31. Схема расщепления уровней энергии и возможных переходов между уровнями.

Задача 2. *Газ из атомов в состоянии $^2D_{3/2}$ подвергли одновременному воздействию постоянного магнитного поля B и перпендикулярного к нему переменного поля B_ν с частотой 2.8 ГГц. При каком значении B возникает резонансное поглощение энергии?*

Решение:

Во внешнем магнитном поле энергетические уровни частиц (электронов, атомов, молекул и т.д.), обладающих ненулевыми магнитными моментами, расщепляются на зеемановские подуровни. Между зеемановскими подуровнями данного уровня энергии могут осуществляться вынужденные переход, вызываемые излучением с частотой, равной частоте возможных переходов. Это явление получило название магнитного резонанса. Частоты переходов между подуровнями зеемановского расщепления приходятся на радиочастотную область и исследуются методами радиоспектроскопии.

Дополнительное осциллирующее магнитное поле эквивалентно наличию квантов электромагнитного излучения $\hbar\omega$, где ω - частота осциллирующего поля. Эти кванты могут быть поглощены атомом, в результате чего в

магнитном поле B энергия атома

$$E = -\boldsymbol{\mu}_J \cdot \mathbf{B} = -\mu_z B, \quad \mu_z = \mu_B g \cdot m_j. \tag{311}$$

изменяется (J- полный механический момент атома, m_j-проекция момента атома на направление магнитного поля $\mathbf{B}$). Это изменение может произойти только в результате переориентировки атома в пространстве, то есть при изменении проекции μ_z магнитного момента в магнитном поле. Изменение энергии при переориентировке атома

$$\Delta E = -B\Delta\mu_z = -Bg\mu_B\Delta m_j = \hbar\omega. \tag{312}$$

Резонансное поглощение энергии возникает при значении модуля магнитной индукции постоянного магнитного поля

$$B = \frac{2\pi\hbar\nu}{g\mu_B} = 2.5 \text{ кГс}. \tag{313}$$

Задача 3. *Определите спектральный символ синглетного терма атома, если полная ширина расщепления его в слабом магнитном поле с индукцией $B = 3.0$ кГс составляет $\Delta E = 104$ мкэВ.*

Решение:

В условии задачи идет речь о синглетном терме атома, поэтому полный спин электронов равен $S = 0$.Тогда гиромагнитный фактор Ланде $g = 1$. Полная величина расщепления определяется крайними зеемановскими компонентами, которым отвечает максимальное значение проекции полного момента. Поэтому

$$\Delta E_{\text{полн}} = \mu_B \cdot B \cdot g \cdot 2j = 2j\mu_B \cdot B. \tag{314}$$

Из этого выражения можно найти значение полного момента атома, которое совпадает со значением полного орбитального момента:

$$j = \frac{\Delta E_{\text{полн}}}{2\mu_B B} = \frac{104 \cdot 10^{-6} \cdot 1.602176 \cdot 10^{-19}\text{Дж}}{2 \cdot 927.400968 \cdot 10^{-26}\frac{\text{Дж}}{\text{Тл}} 3.0 \cdot 10^3 \cdot 10^{-4}\text{Тл}} = 3 = L. \tag{315}$$

Следовательно, спектральный терм атома имеет вид: $^1F_3$.

Задача 4. *При наблюдении некоторой спектральной линии в слабом магнитном поле с индукцией $B = 1.9$ кГс обнаружили, что она представляет собой триплет, интервал между крайними компонентами которого $\Delta\omega = 5.0 \cdot 10^{10}\ c^{-1}$. Одно из состояний, между которыми происходит переход, соответствующий данной линии есть D_2. Найти его мультиплетность.*

Решение:

В слабом магнитном поле данная спектральная линия расщепилась на три компоненты: $(2j+1) = 3$. Следовательно, полный момент атома в этом состоянии равен $j = 1$. Имея ввиду частоту перехода между крайними компонентами этого триплета, данную в условии задачи, мы можем найти фактор Ланде:

$$\Delta E = \hbar\Delta\omega = \mu_B \cdot B \cdot g \cdot 2j = 2\mu_B \cdot B \cdot g, \quad g = \frac{\hbar\Delta\omega}{2\mu_B\ B} = \tag{316}$$

$$= \frac{5.0 \cdot 10^{10}\ c^{-1} \cdot 6.58211928(15) \cdot 10^{-16}\text{эВ} \cdot c}{2 \cdot 5.7883818066(38) \cdot 10^{-5}\frac{\text{эВ}}{\text{Тл}} 1.9 \cdot 10^3 \cdot 10^{-4}\text{Тл}} = \frac{3}{2} = \frac{3}{2} + \frac{S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}.$$

Таким образом, спин атома в этом состоянии равен $S = L = 2$, а мультиплетность состояния $(2S+1) = 5$.

10.3. Задачи для самостоятельного решения

1. Изобразить схему возможных переходов в слабом магнитном поле и вычислить смещения (в единицах $\mu_B B/\hbar$) зеемановских компонент спектральной линии ${}^2D_{5/2} \to {}^2P_{3/2}$.

2. На сколько компонент расщепится в слабом магнитном поле терм ${}^3P_0$, ${}^4F_{5/2}$, ${}^4D_{1/2}$?

3. Какой эффект Зеемана (простой, сложный) обнаруживают в слабом магнитном поле спектральные линии:
   а) ${}^1P \to {}^1S$, б) ${}^2D_{5/2} \to {}^2P_{3/2}$, в) ${}^3D_1 \to {}^3P_0$.

4. Построить схему возможных переходов между термами $^2P_{3/2}$, $^2S_{1/2}$ в слабом магнитном поле. Вычислить для соответствующей спектральной линии:

   a) смещения зеемановских компонент в единицах $\mu_B B/\hbar$;

   b) интервал (см$^{-1}$) между крайними компонентами, если $B = 5.00$ кГс.

5. Построить схему возможных переходов в магнитном поле между следующими состояниями:

   $^1D \to ^1P$, $^1F \to ^1D$.

   Сколько компонент содержит спектральная линия, соответствующая каждому из этих переходов?

6. Вычислить смещения (в единицах $\mu_B B/\hbar$) в слабом магнитном поле зеемановских π- компонент ($\Delta m_j = 0$) спектральной линии: $^3D_3 \to ^3P_2$.

7. Найти магнитный момент атомов Ni (в состоянии ^3F), которые обнаруживают резонансное поглощение энергии при одновременном воздействии постоянного магнитного поля $B = 2.00$ кГс и перпендикулярного к нему переменного поля B_ν при частоте последнего $\nu = 3.5$ ГГц.

8. Найти минимальную разрешающую способность $\lambda/\delta\lambda$ спектрального прибора, который позволит разрешить зеемановскую структуру спектральной линии 589.0 нм ($^2P_{3/2} \to ^2S_{1/2}$) натрия в магнитном поле $B = 2.0$ кГс.

9. Дать физическую интерпретацию обращения аномального эффекта Зеемана в нормальный при переходе от «слабого» магнитного поля к «сильному».

10. Определить, при какой напряженности магнитного поля полные величины расщеплений термов $^2D_{5/2}$, $^2P_{3/2}$ отличаются на $\Delta T = 0.7$ см$^{-1}$.

11. При каком значении напряженности магнитного поля величина естественного расщепления уровня $2P$ атома водорода, определяемая из формулы тонкой структуры, равна интервалам между соседними термами состояния $^2P_{3/2}$ при зеемановском расщеплении.

- **Раби**, Изидор Айзек (29.07.1898-11.01.1988), известный американский физик. Работы относятся к атомной спектроскопии и использованию метода молекулярных пучков для изучения сверхтонкой структуры энергетических уровней атома. В 1933-39 разработал метод измерения магнитных моментов атомных ядер с помощью радиочастотного резонанса и осуществил прецизионные измерения магнитных моментов протона и дейтрона. Нобелевская премия 1944 г..

11. ДВУХАТОМНЫЕ МОЛЕКУЛЫ

11.1. Электронные состояния, вращение и колебание молекул. Краткая теория

Молекула определяется как наименьшая часть вещества, для которой характерны все химические свойства данного вещества. В течение многих веков химики накапливали результаты экспериментов по разложению и синтезу самых различных веществ. Так было обнаружено, что физико-химические свойства сложных веществ (солей, щелочей, окислов и т.д.) очень не похожи на свойства простых, из которых образовано данное сложное вещество. В качестве примера можно привести водород, хлор и хлорид водорода, водный раствор которого, называется соляной кислотой. Это означает, что сложные вещества не являются смесью простых. Еще в 1624 году П. Гассенди предположил, что тела состоят не из первичных атомов, а из их соединений, которые он назвал молекулами. Это слово образовано от латинского moles (масса) и уменьшительного суффикса cula. М.В. Ломоносов в своей теории строения материи утверждал, что все вещества состоят из корпускул (молекул), которые представляют собой разнообразные сочетания элементов (атомов). При этом физико-химические свойства молекул могут резко отличаться от свойств атомов. Эти умозрительные идеи нашли подтверждение лишь в XX веке, когда стали использоваться физические методы исследования микроструктуры вещества.

Отдельные атомы могут соединяться, образуя устойчивые соединения - молекулы. Массы атомных ядер значительно больше массы электрона, поэтому в первом приближении (адиабатическое приближение или приближение Борна-Оппенгеймера) при изучении молекул можно считать ядра

неподвижными и рассматривать только движение электронов. Таким образом возникает задача об электронных состояниях молекулы. В этой задаче предполагается, что электроны движутся в заданном жестком остове, образуемым ядрами молекулы. Уровни энергии такой электронной системы (они называются электронными термами) будут зависеть от расстояний между ядрами молекулы и угловых переменных, характеризующих их взаимное расположение, как от некоторых постоянных внешних параметров. В следующем приближении следует учитывать вращение молекулярного остова и колебания ядер молекулы около их устойчивых положений равновесия. Таким образом, из-за большой разницы в массах ядер и электрона возникает возможность разделения состояний и энергетических спектров молекул на три резко разделенные группы: электронные состояния, вращательные состояния и колебательные состояния. Наибольшие энергии соответствуют электронным состояниям, далее следуют энергии, соответствующие колебательным состояниям, и наконец, наименьшая энергия соответствует вращательным состояниям. В соответствии со сказанным энергия молекулы может быть представлена как сумма энергий электронного, колебательного и вращательного движений:

$$E = E_{\text{эл}} + E_{\text{кол}} + E_{\text{вр}}. \tag{317}$$

Форма и размеры молекул могут быть весьма разнообразными в соответствии с разнообразием состава и строения химических соединений. Молекулы могут быть линейными, плоскими, неплоскими, они могут состоять из цепей атомов, неразветвленных и разветвленных, из кольцевых структур и т.д. При этом скелет молекулы - ее равновесная конфигурация - может обладать различной степенью гибкости, и возможны молекулы, для которых одни ее части легко вращаются относительно других частей.. Расстояния между соседними атомами в молекуле обычно составляет $0.1 \div 0.2$ нм.

В дальнейшем мы ограничимся рассмотрением только двухатомных молекул. При образовании молекулы заполненные электронные оболочки атомов практически не изменяются. Существенно меняется лишь распределение валентных электронов, находящихся на незаполненных оболочках. Например, в молекуле $NaCl$ валентный электрон Na переходит к атому Cl, поэтому молекула $NaCl$ состоит из положительного иона Na^+ и отрицательного иона Cl^-. Этот пример относится к случаю гетерополярной (или ионной) связи. В этом примере около одного из ядер образуется избыток электронов, а около другого их недостаток. Молекула в этом случае

состоит из двух ионов противоположных знаков. Примером молекул с гетерополярной связью могут служить NaCl, KBr, HCl и др. Второй вид связи наблюдается в тех молекулах, в которых часть электронов движется около обоих ядер. Такая связь называется гомеополярной (или ковалентной). В двухатомных молекулах с ковалентной связью периферийные электроны образуют единую внешнюю оболочку, распределенную вокруг обоих ядер. Двухатомные молекулы с гомеополярной связью можно разделить на две группы. В первую входят молекулы с одинаковыми ядрами (N_2, H_2 и др.). В молекулах второй группы, состоящих из атомов с разными ядрами (CN, NH, и др.) электронное облако распределено асимметрично относительно ядер, благодаря чему у молекул возникают дополнительные дипольные моменты.

Молекула представляет собой систему, состоящую из электронов и нескольких атомных ядер. Поскольку масса атомных ядер значительно превосходит массу электронов, можно разбить движение в молекуле на медленное движение ядер и быстрое движение электронов. При исследовании движения электронов координаты ядер изменяются , и можно считать их неизменными (адиабатическое приближение). Уравнение Шредингера для молекулы имеет вид:

$$\hat{H}(\mathbf{r}_i, \mathbf{R}_i)\psi(\mathbf{r}_i, \mathbf{R}_i) = E\psi(\mathbf{r}_i, \mathbf{R}_i), \tag{318}$$

где $\mathbf{r}_i$ -координаты электронов, $\mathbf{R}_i$ -координаты ядер. Гамильтониан молекулы состоит из нескольких частей. Оператор кинетической энергии электронов

$$\hat{T}_r = -\frac{\hbar^2}{2m}\sum \nabla^2_{r_i}. \tag{319}$$

Оператор кинетической энергии ядер

$$\hat{T}_r = -\frac{\hbar^2}{2}\sum \frac{1}{M_i}\nabla^2_{R_i}. \tag{320}$$

Оператор потенциальной энергии всехчастиц $V(\mathbf{r}_i, \mathbf{R}_i)$. Полный гамильтониан, таким образом, равен

$$\hat{H} = \hat{T}_r + \hat{T}_R + V(\mathbf{r}_i, \mathbf{R}_i). \tag{321}$$

Решение исходного уравнения Шредингера будем искать методом разделения переменных, представив волновую функцию молекулы в виде произведения волновых функций электронов и ядер

$$\psi(\mathbf{r}_i, \mathbf{R}_i) = \psi_r(\mathbf{r}_i) \cdot \psi_R(\mathbf{R}_i). \tag{322}$$

Необходимо иметь ввиду, что волновая функция электронов зависит от $\mathbf{R}_i$ как от параметров, которые можно считать постоянными величинами $\mathbf{R}_i = const$ (адиабатическое приближение). Производя разделение переменных, получим:

$$\frac{1}{\psi_r}[E - \hat{T}_r - V(\mathbf{r}_i, \mathbf{R}_i)]\psi_r = \frac{1}{\psi_R}\hat{T}_R\psi_R = E_R - U(\mathbf{R}_i), \qquad (323)$$

где мы ввели величину разделения $E_R - U(\mathbf{R}_i)$, которую в уравнении для электронов следует считать постоянной величиной. Таким образом, в адиабатическом приближении мы можем разбить уравнение Шредингера на два уравнения для ядер и для электронов:

$$[\hat{T}_R + U(\mathbf{R}_i)]\psi_R = E_R\psi_R, \quad [\hat{T}_r + V(\mathbf{r}_i, \mathbf{R}_i)]\psi_r = E_r(\mathbf{R}_i)\psi_r, \qquad (324)$$

где $E_r = E - E_R + U(\mathbf{R}_i)$ при условии, что ядра покоятся $\mathbf{R}_i = const$. В случае двухатомных молекул величину U следует рассматривать как энергию связи атомов в молекуле. Для сложных атомов ее задают с помощью полуэмпирического закона. Будем считать, что в случае двухатомной молекулы энергия взаимодействия $U(\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2)$, а M_1, M_2 - массы ядер. Как обычно в задаче двух тел мы можем переписать исходное уравнение Шредингера для ядер в системе центра масс, вводя относительную координату ядер $\mathbf{r} = \mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2$ и приведенную массу двух ядер $M_{\text{пр}}$:

$$\nabla^2\psi_R + \frac{2M_{\text{пр}}}{\hbar^2}(E_R - U(r))\psi_R = 0 \qquad (325)$$

Для образования устойчивой молекулы потенциальная энергия $U(r)$ должна меняться определенным образом. Мы считаем, что потенциальная энергия обладает центральной симметрией. При $r \to 0$ $U(r) \to \infty$, так как атомы не могут находиться сколь угодно близко друг к другу. Коме того при $r \to infty$ $U(r) \to 0$. Для образования устойчивого сосояния молукулы потенциальная энергия $U(r)$ должна иметь минимум, так как показано на Рис. 32.

При изучении системы вблизи положения равновесия можно разложить потенциальную энергию в ряд, сохранив как обычно основной вклад в таком разложении (энергия упругости и энергия диссоциации молекулы):

$$U(r) = -D + \frac{1}{2}M_{\text{пр}}\omega^2x^2, \quad x = r - r_0, \quad U"(r_0) = M_{\text{пр}}\omega^2. \qquad (326)$$

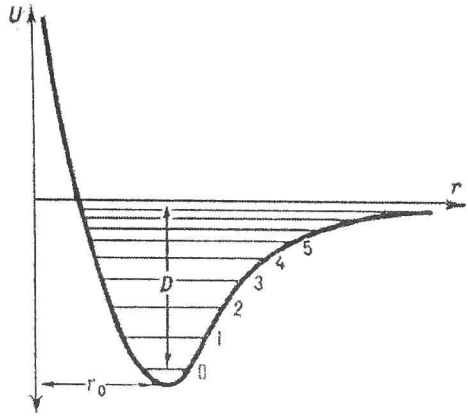

Рис. 32. Потенциальная энергия двухатомной молекулы.

Энергетические уровни молекулы тогда можно найти из уравнения Шредингера для радиальной части волновой функции:

$$\nabla_r^2 R + [\frac{2M_{\text{пр}}}{\hbar^2}(E - U(r)) - \frac{l(l+1)}{r^2}]R = 0 \tag{327}$$

Вводя функцию $u = r \quad R$, приведем уравнение Шредингера к виду:

$$\frac{d^2u}{dr^2} + \frac{2M_{\text{пр}}}{\hbar^2}[E + D - \frac{1}{2}M_{\text{пр}}\omega^2 x^2 - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2M_{\text{пр}}r^2}]u = 0. \tag{328}$$

Заменим также $r \approx r_0$ в последнем слагаемом. Тогда, вводя обозначение $E' = E + D - Bl(l+1)\hbar$, $B = \hbar/2J$, $J = M_{\text{пр}}r_0^2$, приводим уравнение к уравнению для линейного гармонического осциллятора:

$$u'' + \frac{2M_{\text{пр}}}{\hbar^2}[E' + D - \frac{1}{2}M_{\text{пр}}\omega^2 x^2]u = 0. \tag{329}$$

Значения энергии E' для этого уравнения хорошо известны, и мы получаем окончательно уровни энергии молекулы в виде:

$$E = -D + B\hbar l(l+1) + \hbar\omega(\kappa + \frac{1}{2}). \tag{330}$$

Сюда входит энергия диссоциации, энергия вращения молекулы и энергия колебаний. Число дискретных энергетических уровней ограничено условием: $B\hbar l(l+1) + \hbar\omega(\kappa + \frac{1}{2}) \geq D$. Распад молекулы обусловлен либо большими

центробежными силами, разрывающими ее, либо большими амплитудами колебаний, при которых атомы перестают взаимодействовать.

Перйдем к описанию электронных состояний двухатомной молекулы, начиная с одноэлектронной молекулярной системы (пример ион водорода H_2^+). Наша система содержит только один валентный электрон. Остальные электроны образуют замкнутые оболочки, влияние которых сводится к экранированию заряда ядра. Уравнение Шредингера для электрона запишем в цилиндрических координатах, так как данная задача имест аксиальную симметрию с осью симметрии вдоль линии, соединяющей ядра:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}+\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]\psi(\rho,z,\phi)+V(\rho,z)\psi(\rho,z,\phi)=E\psi(\rho,z,\phi), \tag{331}$$

где V потенциальная энергия электрона в экранированном поле ядер, которая не зависит от угла ϕ. Решение уравнения Шредингера ищем в виде:

$$\psi(\rho,z,\phi)=\Psi(\rho,z)\Phi(\phi) \tag{332}$$

Решения для волновой функции $\Phi(\phi)$ имеют вид:

$$\Phi(\phi)=e^{i\Lambda\phi},\quad e^{-i\Lambda\phi},\quad \Lambda=0,1,2,... \tag{333}$$

Λ - проекция орбитального момента электрона на ось z (ось симметрии молекулы), константа движения. Функция $\Psi(\rho,z)$ удовлетворяет уравнению:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}-\frac{\Lambda^2}{\rho^2}\right]\Psi(\rho,z)+V(\rho,z)\Psi(\rho,z)=E\Psi(\rho,z). \tag{334}$$

Функция $\Psi(\rho,z)$ и энергия E зависят от Λ^2. Состояния электрона можно классифицировать по величине Λ. Каждый уровень или терм электрона будет дважды вырожден при $\Lambda\neq 0$, что связано с двумя возможными направлениями вращения вокруг оси симметрии. Λ аналогична орбитальному моменту L в теории атома. Аналогия между L и λ находит свое выражение в обозначениях атомных и молекулярных термов. Для электронных термов двухатомной молекуля с $\Lambda=0,1,2..$ используются обозначения $\Sigma,\Pi,\Delta....$ Учтем теперь спин электрона, который может устанавливаться параллельно либо антипараллельно оси молекуля. Суммарный электронный момент может принимать значения $\Omega=\Lambda\pm\frac{1}{2}$. Двум ориентациям спина соответствуют разные энергии (спин-орбитальное расщепление).

Квантовое число Λ можно ввести и в случае двухатомной молекулы с любым числом электронов. Действительно, если не учитывать движение

ядер и спин электрона, то проекция суммарного орбитального момента электронов будет сохраняться, так как поле в молекуле обладает аксиальной симметрией. Математически это связано с тем, что оператор проекции орбитального момента на ось z $M_z = -i\hbar\partial/\partial\phi$ коммутирует с оператором потенциальной энергии двухатомной молекулы, который не зависит от ϕ, а, следовательно, и с гамильтонианом. Эта величина совпадает с $\Lambda = 0, 1, 2, ...$ Кроме Λ сохраняется также суммарная проекция спина электронов, которая принимает значения $-S, -S+1. ..., S$. Проекция полного момента Ω может принимать значения: $\Lambda+S, \Lambda+S-1, ..., \Lambda-S$. Электронный терм характеризуется тремя числами Λ, Ω, S и обозначается $^{2S+1}\Lambda_\Omega$. Например, запись $^3\Pi_2$ означает, что $\Lambda = 1$, $S = 1$, $\Omega = 2$.

Рассмотрим теперь механизм образования устойчивой молекулы H_2 Рис. 33. Ее образование было полной загадкой для доквантовой теории, так как в молекулу водорода не входят ионы противоположные по знаку заряда. Согласно наблюдениям энергия диссоциации молекулы H_2 равна 4.48 эВ, равновесное расстояние между протонами 0.074 нм. Ковалентная связь в молекуле H_2 обусловлена притяжением ядер движущимися между ними электронами, которые можно считать связующими. Теория молекулы водорода была построена в 1927 г. В. Гайтлером и Ф. Лондоном.

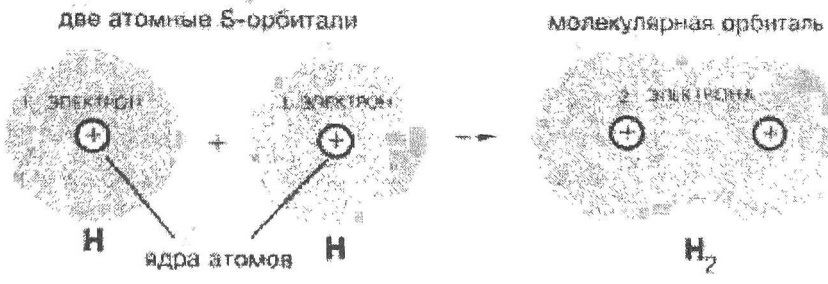

Рис. 33. Возникновение ковалентной связи при образовании молекулы водорода.

Так как молекула водорода содержит два электрона, то необходимо вначале проклассифицировать состояния двухэлектронной системы. Как мы знаем, волновая функция электрона представляет собой двухкомпонентный столбец. Если не учитывать орбитальный момент, то можно ввести

две чисто спиновые функции электрона:

$$\alpha = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_{s_z=1/2}, \quad \beta = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_{s_z=-1/2}. \tag{335}$$

Они соответствуют двум проекциям спина $\pm 1/2$. Спиновая волновая функция системы двух электронов может быть выражена через произведение спиновых волновых функций отдельных электронов. Можно считать, что базис спиновых функций двухэлектронной системы образуют четыре функции $\alpha\alpha$, $\alpha\beta$, $\beta\alpha$, $\beta\beta$. Однако эти базисные функции не являются собственными функциями операторв $\mathbf{S} = \mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2$ и $S_z = s_{1z} + s_{2z}$. Полный спин электронной системы может принимать два значения S=0, 1. Состояния с проекцией полного спина $S_z = 1$, $S_z = -1$ являются заведомо симметричными по отношению к спинам обеих электронов. Поэтому все три состояния со спином S=1 являются симметричными и спиновыми функцмями их следует считать три симметричные функции $\alpha\alpha$, $\frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha\beta + \beta\alpha)$, $\beta\beta$. Ортогональной к этим функциям является антисимметричная функция $\frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha\beta - \beta\alpha)$, которой соответствует спин S=0. Таким образом, если спины обоих электронов параллельны (S=1), то их спиновые функции симметричны, если антипараллельны (S=0), то их спиновая функция антисимметрична. Структура общей волновой функции системы

$$\psi(\xi_1, \xi_2) = \begin{cases} \chi_{1S_z} u_a(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), S = 1, S_z = -1, 0, 1 \\ \chi_{00} u_s(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), S = 0, S_z = 0 \end{cases} \tag{336}$$

Для нахождения симметричной и антисимметричной функций координат необходимо использовать уравнение Шредингера. Если вначале пренебречь взаимодействием электронов, гамильтониан системы будет иметь вид: $\hat{H}_0 = \hat{H}_1 + \hat{H}_2$. Решение одноэлектронной задачи определяется из уравнения:

$$\hat{H}_1 \psi_n(\mathbf{r}_1) = E_n \psi_n(\mathbf{r}_1). \tag{337}$$

Функции $\psi_n(\mathbf{r})$ ортонормированы. Волновые функции двухэлектронной системы будут тогда иметь вид:

$$\chi_{1S_z} u_a(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2); \quad \chi_{00} u_s(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \tag{338}$$

$$u_s(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_n(\mathbf{r}_1)\psi_m(\mathbf{r}_2) + \psi_m(\mathbf{r}_1)\psi_n(\mathbf{r}_2], \tag{339}$$

$$u_a(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_n(\mathbf{r}_1)\psi_m(\mathbf{r}_2) - \psi_m(\mathbf{r}_1)\psi_n(\mathbf{r}_2]. \tag{340}$$

Функции $u_s(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, $u_a(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ ортогональны. Каждое значение энергии системы $E_n + E_m$ имеет кратность вырождения 4. Учтем теперь энергию кулоновского взаимодействия электронов:

$$V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}. \tag{341}$$

Будем считать $V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ малым возмущением, чтобы можно было применить метод теории возмущений. В рассматриваемом нами случае двухэлектронной системы поправка к энергии $E_n + E_m$ определяется следующим матричным элементом:

$$\Delta E = \int \psi(\xi_1, \xi_2)^* \hat{V} \psi(\xi_1, \xi_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2. \tag{342}$$

Подставляя сюда выражения для волновых функций системы двух электронов, получим смещение уровней энергии в случае состояний со спином 0 и 1:

$$\Delta E(S=1) = A - B, \quad \Delta E(S=0) = A + B, \tag{343}$$

$$A = \int |\psi_n(\mathbf{r}_1)|^2 |\psi_m(\mathbf{r}_2)|^2 d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}, \tag{344}$$

$$B = \int \psi_n(\mathbf{r}_1)\psi_m(\mathbf{r}_2)\psi_n(\mathbf{r}_2)\psi_m(\mathbf{r}_1) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}. \tag{345}$$

Величину A называют электростатической энергией взаимодействия электронов, а величину B обменной энергией.

Вернемся теперь к изучению молекулы водорода. Гамильтониан молекулы можно представить в виде:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(\mathbf{p}_1^2 + \mathbf{p}_2^2\right) + \frac{e^2}{r} + \frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_{a1}} - \frac{e^2}{r_{a2}} - \frac{e^2}{r_{b1}} - \frac{e^2}{r_{b2}}, \tag{346}$$

где $r = r_{ab}$ - расстояние между ядрами a и b. $\mathbf{r}_1$, $\mathbf{r}_2$ - радиусы-векторы электронов. Нам необходимо найти собственные значения этого гамильтониана в зависимости от внешнего параметра r. При этом необходимо различать два случая, когда S=0 и S=1. Решаем эту задачу методом теории возмущений аналогично разобранной выше задаче о двух электронах. Когда атомы водорода не взаимодействуют друг с другом, волновые функции электронов удовлетворяют уравнениям:

$$\hat{H}(1)\psi_a(1) = \left(\frac{1}{2m}\mathbf{p}_1^2 - \frac{e^2}{r_{a1}}\right)\psi_a(1) = E_0\psi_a(1), \tag{347}$$

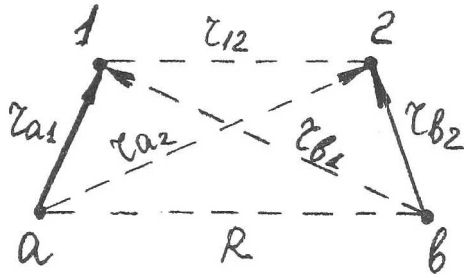

Рис. 34. Координаты электронов и ядер в молекуле водорода.

$$\hat{H}(2)\psi_b(2) = \left(\frac{1}{2m}\mathbf{p}_2^2 - \frac{e^2}{r_{b2}}\right)\psi_b(2) = E_0\psi_b(2), \tag{348}$$

где E_0 - энергия атома водорода в основном состоянии. Гамильтониан системы можно переписать в виде:

$$\hat{H} = \hat{H}(1) + \hat{H}(2) + \hat{V}(1,2) + \frac{e^2}{r}, \quad \hat{V}(1,2) = \frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_{b1}} - \frac{e^2}{r_{a2}}. \tag{349}$$

В гамильтониане $\hat{V}(1,2)$ имеется взаимодействие между электронами, а также электронов с чужими ядрами. Будем рассмтривать $\hat{V}(1,2)$ как малое возмущение и найдем энергию системы в первом порядке теории возмущений. Найдем сразу среднее значение полного гамильтониана с волновой функцией нулевого приближения. Обозначим волновые функции состояний со спином S=0 $\psi_+(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)$ (симметричная волновая функция) и со спином S=1 $\psi_-(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)$ (антисимметричная волновая функция):

$$\psi_\pm(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) = C_\pm[\psi_a(1)\psi_b(2) \pm \psi_a(2)\psi_b(1)]. \tag{350}$$

Константы $C_\pm$ находятся из условия нормировки. Учитывая нормировку волновых функций $\psi_a(1)$, $\psi_b(2)$ находим:

$$C_\pm = \frac{1}{\sqrt{2(1\pm\beta^2)}}, \quad \beta = \int \psi_a(1)\psi_b(1)d^3r_1. \tag{351}$$

Значения энергии $E_\pm$ определяются формулой для состояний S=0 и S=1:

$$E_\pm = \int \psi_\pm \hat{H} \psi_\pm d^3r_1 d^3r_2 = \tag{352}$$

$$2E_0 + \frac{e^2}{r} + \frac{1}{(1 \pm \beta^2)} \int \left(\frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_{a2}} - \frac{e^2}{r_{b1}} \right) \psi_a^2(1) \psi_b^2(2) d^3r_1 d^3r_2 \pm$$

$$\frac{1}{(1 \pm \beta^2)} \int \left(\frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_{a2}} - \frac{e^2}{r_{b1}} \right) \psi_a(1)\psi_b(1)\psi_a(2)\psi_b(2)) d^3r_1 d^3r_2.$$

В это выражение входит ряд слагаемых. Первое слагаемое - энергия двух независимых атомов водорода. Второе слагаемое - энергия кулоновского отталкивания ядер. Третье слагаемое - энергия электростатического взаимодействия двух электронных облаков между собой и с чужими ядрами. Четвертое слагаемое называют обменной энергией. Энергии $E_\pm$ являются функциями расстояний междуядрами r (синглетное состояние со спином 0 E_+, триплетное состояние со спином 1 E_-). Зависимости $E_\pm$ от r (R) показаны на Рис. 35. Функция E_- для триплетного состояния монотонно убывает. Функция E_+ имеет минимум, наличие которого означает существование положения равновесия. Молекула водорода образуется только в случае антипараллельной ориентации спинов электронов. Механизм образования молекуля связан с наличием обменной энергии, которая возникает из-за того, что атомы обмениваются своими электронами. Существование обменной энергии является чисто квантовым эффектом. Механизм химической связи имеет чисто квантовое происхождение. Основным электронным термом в молекуле водорода является $^1\Sigma_0$.

Заметим, что интегралы, входящие в $E_\pm$ могут быть вычислены аналитически с использованием явного вида волновых функций, а затем разложены в ряд по степеням отношения r/a_0 (a_0 - первый боровский радиус в атоме водорода):

$$E_+ = \frac{e^2}{r} \left(1 - \frac{11r}{8a_0} + ... \right), \quad E_- = \frac{e^2}{r} \left(1 + \frac{r}{2a_0} + ... \right) \tag{353}$$

Теоретическое значение равновесного расстояния, полученного в работах Гайтлера-Лондона равно $r_0 = 1.518a_0 = 0.80$ А. Энергия диссоциации при этом равна $D = -E_+(r_0) = 3.14$ эВ. Соответствующие экспериментальные данные имеют значения $r_0 = 0.7395$ А, $D_{exp} = 4.48$ эВ. Расхождение теоретических и экспериментальных результатов следует отнести за счет математического несовершенства метода теории возмущений в применении к данной задаче.

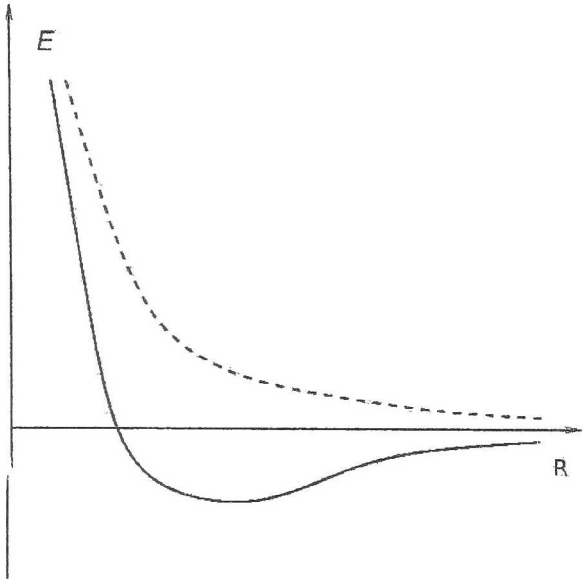

Рис. 35. Зависимость потенциальной энергии ядер в молекуле водорода от расстояния между ядрами R. Пунктирной линией показано симметричное состояние со спином 1. Сплошной линией показано антисимметричное состояние со спином 0.

11.2. Примеры решения задач

Задача 1. *Найти с помощью таблиц Приложения для молекул H_2 и NO:*

а) энергию, необходимую для возбуждения их на первый вращательный уровень ($J = 1$),

б) угловую скорость вращения в состояниях с $J = 1$.

Решение:

Вращательная энергия двухатомной молекулы имеет вид:

$$E_J = \hbar B J(J+1), \quad B = \frac{\hbar}{2I}, \tag{354}$$

где B вращательная постоянная, I момент инерции молекулы, J вращательное квантовое число: J=0,1,2,... Энергию, необходимая для возбуж-

дения на первый вращательный уровень J=1 равна:

$$E_1 = \frac{\hbar^2}{I}, \quad d = 74.1\text{нм}, \quad I = \mu d^2 = \frac{1}{2} m_p d^2 \tag{355}$$

Численные значения энергий возбуждения молекул H_2 и NO равны:

$$E_1(H_2) = \frac{(0.6582 \cdot 10^{-15})^2 \cdot 9 \cdot 10^{16}}{74.1^2 \cdot 10^{-24} \frac{1}{2} 939 \cdot 10^6} \approx 15 \text{ мэВ}, \tag{356}$$

$$E_1(NO) = \frac{(0.6582 \cdot 10^{-15})^2 \cdot 9 \cdot 10^{16}}{115^2 \cdot 10^{-24} \frac{16 \cdot 939 \cdot 14 \cdot 939 \cdot 10^6}{30 \cdot 939}} \approx 0.42 \text{ мэВ}. \tag{357}$$

При вычислении частоты вращения двухатомной молекулы воспользуемся известной формулой $E_{\text{вр}} = \frac{1}{2} I \omega^2$. В результате частоты вращений данных молекул равны:

$$\omega = \frac{c}{d} \sqrt{\frac{2E_{\text{вр}}}{\mu c^2}} = 3.2 \cdot 10^{13} \text{ рад/с } (H_2); 9.03 \cdot 10^{11} \text{ рад/с } (NO). \tag{358}$$

Задача 2. *Найти разность энергий состояний с квантовыми числами* $v_1 = 1$ *(v-колебательное квантовое число),* $J_1 = 0$ *и* $v = 0$, $J = 5$ *у молекулы OH.*

Решение:

Вращательная энергия двухатомной молекулы равна:

$$E_J = \hbar B J(J+1), \quad B = \frac{\hbar}{2I}, \tag{359}$$

где B вращательная постоянная, I момент инерции, J вращательное квантовое число. В тоже время колебательная энергия двухатомной молекулы с учетом ангармоничности x имеет вид:

$$E_v = \hbar\omega(v + \frac{1}{2})[1 - x(v + \frac{1}{2})], \quad \omega^2 = \frac{\kappa}{\mu} \tag{360}$$

Для гармонического осциллятора $x = 0$. Запишем энергии молекулы в состояниях с указанными в условии задачи квантовыми числами:

$$E_{v_1,J_1} = \hbar\omega\frac{3}{2}[1 - x\frac{3}{2}], \quad E_{v,J} = 30\hbar B + \frac{1}{2}\hbar\omega[1 - \frac{1}{2}x]. \tag{361}$$

Разность этих энергий можно выразить в терминах параметров B, ω, I, x молекулы OH:

$$\delta E = E_{v_1,J_1} - E_{v,J} = \hbar\omega(1-2x) - 15\frac{\hbar^2}{I} \tag{362}$$

По таблице находим константы молекулы OH: $\omega = 7.036 \cdot 10^{14}$ рад·с, $\mu = \frac{16}{17}m_p$, $d = 97.1$ нм, $I = \mu \cdot d^2$, $x = 22.2 \cdot 10^{-3}$. В результате, численное значение разности энергий равно 0.37 эВ.

Задача 3. *Для молекул HF собственная частота колебаний равна $\omega = 7.796 \cdot 10^{14}$ рад/с, а расстояние между ядрами составляет 91.7 пм. Найти число вращательных уровней, расположенных между нулевым и первым возбужденным колебательными уровнями, считая, что вращательное движение не зависит от колебательного.*

Решение:

Воспользуемся формулами для вращательной и колебательной энергиями двухатомных молекул в гармоническом приближении:

$$E_J = \frac{\hbar^2}{2I}J(J+1), \quad J = 0, 1, 2, \ldots, \quad E_v = \hbar\omega(v+\frac{1}{2}), \quad v = 0, 1, 2, \ldots \tag{363}$$

Интервал между основным и первым возбужденным колебательным уровнями энергии равен:

$$\Delta E = \hbar\omega = \frac{\hbar^2}{2I}J(J+1). \tag{364}$$

Отсюда находим J в виде:

$$J = \frac{1}{2} + \sqrt{1 + \frac{8I\omega}{\hbar}} = 22. \tag{365}$$

Задача 4. *Для анализа колебательно-вращательного спектра двухатомной молекулы Кратцер предложил использовать потенциал вида*

$$V(r) = -2D\left(\frac{a}{r} - \frac{1}{2}\frac{a^2}{r^2}\right) \tag{366}$$

с минимумом $V(a) = -D$. Решить уравнение Шредингера, считая, что один из атомов значительно тяжелее другого. В этом предположении считать тяжелый атом неподвижным.

Решение:

Движение легкого атома массы m описывается уравнением Шредингера:

$$\nabla^2 u + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E + 2D\left(\frac{a}{r} - \frac{a^2}{2r^2}\right)\right] u = 0. \tag{367}$$

Ищем решение методом разделения переменных:

$$u = \frac{1}{r}\chi_l(r) Y_{lm}(\theta, \phi). \tag{368}$$

Введем безразмерные переменные:

$$x = \frac{r}{a}, \quad \beta^2 = -\frac{2ma^2}{\hbar^2}E, \quad \gamma^2 = \frac{2ma^2}{\hbar^2}D. \tag{369}$$

Тогда для радиальной части волновой функции получим следующее уравнение:

$$\frac{d^2\chi_l}{dx^2} + \left[-\beta^2 + \frac{2\gamma^2}{x} - \frac{\gamma^2 + l(l+1)}{x^2}\right]\chi_l = 0. \tag{370}$$

При $x \to \infty$ решение ведет себя как $e^{-\beta x}$. При $x \to 0$ ищем решение в виде x^λ:

$$\lambda(\lambda - 1) = \gamma^2 + l(l+1), \quad \lambda = \frac{1}{2} + \sqrt{\gamma^2 + (l + \frac{1}{2})^2}. \tag{371}$$

Далее будем искать решение в виде

$$\chi_l(x) = x^\lambda e^{-\beta x} f(x), \tag{372}$$

что приводит к уравнению для вырожденной гипергеометрической функции

$$xf'' + (2\lambda - 2\beta x)f' + (-2\lambda\beta + 2\gamma^2)f = 0 \tag{373}$$

Стандартная форма уравнения для гипергеометрической функции получается после замены $z = 2\beta x$. Таким образом, решение имеет вид:

$$f(x) =_1 F_1(\lambda - \frac{\gamma^2}{\beta}, 2\lambda, 2\beta x). \tag{374}$$

Нормированное решение получается при выполнении условия (ряд для вырожденной гипергеометрической функции превращается в конечный полином):

$$\lambda - \frac{\gamma^2}{\beta} = -n_r, \quad n_r = 0, 1, 2, ... \tag{375}$$

Уровни энергии системы принимают вид:

$$E = -\frac{\hbar^2}{2ma^2}\frac{\gamma^4}{(n_r+\lambda)^2}. \tag{376}$$

Подставляя сюда λ, получим окончательно:

$$E = -\frac{\hbar^2}{2ma^2}\gamma^4\left[n_r+\frac{1}{2}+\sqrt{(l+\frac{1}{2})^2+\gamma^2}\right]^{-2} \tag{377}$$

Для большинства молекул $\gamma \gg 1$, поэтму после разложения фукции в ряд по степеням $1/\gamma$, получим:

$$E = D\left[-1+\frac{2(n_r+\frac{1}{2})}{\gamma}+\frac{(l+\frac{1}{2})^2}{\gamma^2}-\frac{3(n_r+\frac{1}{2})^2}{\gamma^2}-\frac{3(n_r+\frac{1}{2})(l+\frac{1}{2})^2}{\gamma^3}...\right]. \tag{378}$$

Введем классическую частоту малых колебаний ω, используя разложение потенциала в окрестности положения равновесия:

$$V(r) = D\frac{(r-a)^2}{a^2} - D. \quad \omega = \sqrt{\frac{2D}{ma^2}}. \tag{379}$$

Введем также момент инерции $\Theta = ma^2$ Тогда значения энергии молекулы примут вид:

$$E = -\frac{1}{2}\Theta\omega^2+\hbar\omega(n_r+\frac{1}{2})+\frac{\hbar^2}{2\Theta}(l+\frac{1}{2})^2-\frac{3\hbar^2}{2\Theta}(n_r+\frac{1}{2})^2-\frac{3\hbar^3}{2\Theta^2\omega}(n_r+\frac{1}{2})(l+\frac{1}{2})^2... \tag{380}$$

Первый член является постоянной величиной. Второй и третий члены описывают колебательные и вращательные уровни соответственно. Четвертый член ведет к понижению колебательных уровней из-за ангармоничности потенциала. Пятый член характеризует связь между вращениями и колебаниями из-за ангармоничности.

11.3. Задачи для самостоятельного решения

1. Найти для молекулы HCl квантовые числа J двух соседних вращательных уровней, разность энергий которых 7.86 МэВ.

2. Определить термы двухатомных молекул N_2, LiH, Hcl, NO, которые могут получиться при соединении соответствующих атомов, находящихся в основном состоянии.

3. Найти механический момент молекулы кислорода, вращательная энергия которой $E = 2.16$ мэВ.

4. Смесь кислорода и водорода находится при низком давлении, ее температура T=300 K. Определить частоту вращения и линейную скорость движения атомов в молекуле при таком движении, считая, что вращательная энергия, приходящаяся на одну степень свободы, равн нп средней кинетической энергии молекул газа $< E_k >$. Какому вращательному уровню молекул H_2, O_2 соответствует энергия наиболее близкая к $< E_k >$? Межядерное расстояние равно 0.75 A для водорода и 1.21 A для кислорода.

5. Вычислить разность энергий диссоциации молекул водорода и дейтерия, если известна частота колебаний молекулы H_2. Кривые потенциальной энергии $U(\rho)$ для обеих молекул одинаковы.

6. Определить угловую скорость вращения молекулы S_2, находящейся в первом возбужденном состоянии, если расстояние между ее ядрами d=189 пм.

7. Определить энергию, соответствующую первому вращательному уровню молекулы HCL, если расстояние между ядрами молекуля равно 127.5 пм.

8. Оцените, сколько линий содержится во вращательном спектре молекул Br_2, если собственная частота их колебаний $\omega = 6.08 \cdot 10^{13}$ рад/с и момент инерции $I = 3.46 \cdot 10^{-38}$ г $\cdot$ см^2

9. Найти отношение энергий, которые нужно затратить для возбуждения двухатомной молекулы на первый колебательный и первый вращательный уровни Вычислить это отношение для молекул H_2, HI, I_2.

10. Найти для молекулы HF число вращательных уровней, расположенных между нулевым и первым возбужденным колебательными уровнями, считая вращательные состояния не зависящими от колебательных.

11.4. Биографическое примечание

- **Оппенгеймер**, Роберт Джулиус (22.04.1904 - 18.02.1967) - американ-

ский физик-теоретик, профессор физики Калифорнийского университета в Беркли. Широко известен как научный руководитель Манхэттенского проекта, в рамках которого в годы Второй мировой войны разрабатывались первые образцы ядерного оружия. Наиболее значительные достижения Оппенгеймера в физике включают: приближение Борна - Оппенгеймера для молекулярных волновых функций, работы по теории электронов и позитронов, процесс Оппенгеймера - Филлипс в ядерном синтезе и первое предсказание квантового туннелирования. Вместе со своими учениками он внёс важный вклад в современную теорию нейтронных звёзд и чёрных дыр, а также в решение отдельных проблем квантовой механики, квантовой теории поля и физики космических лучей.

- **Гайтлер** Вальтер Генрих (2.01.1904-15.11.1981) -немецкий физик-теоретик. Работы посвящены квантовой теории, квантовой механике, квантовой электродинамике, физике космических лучей, теории ядерных сил, мезонной физике, философии науки. Вместе с Ф. Лондоном впервые приближенно рассчитал молекулу водорода (метод Гайтлера - Лондона), чем было положено начало квантовой химии. Совместно с Г. Герфергом определил (1929) статистику ядра азота, показав, что оно должно подчиняться статистике Бозе Эйнштейна. Это было решающим аргументом против протонно-электронной гипотезы строения ядер. Предсказал (1934) существование комптоновских процессов более высоких порядков, в которых за один элементарный акт создаются два или более рассеянных квантов. Совместно с Х. Бете разработал в 1934 теорию радиационных потерь электрона при движении в веществе, независимо от. других предложил в 1937 каскадную теорию электронных ливней в космических лучах. Построил (1938) векторную мезонную теорию ядерных сил. В 1940 ввел представление о высших спиновых и зарядовых состояниях, в 1941 построил квантовую теорию радиационного затухания, применив ее к мезон-нуклонному рассеянию

- **Лондон**, Фриц Вольфганг (7.03.1900 - 30.03.1954) - немецкий физик-теоретик. Научные работы посвящены спектроскопии, квантовой механике, физике низких температур, теории сверхпроводимости и сверхтекучести в жидком гелии. Совместно с В. Г. Гайтлером разработал квантово-механический метод приближенного расчета длины

и энергии связи в молекулярном ионе и молекуле водорода (метод Гайтлера-Лондона) (1927), чем положил начало квантовой химии. Развил теорию ван-дер-ваальсовых сил притяжения между молекулами (1929). В 1935 г. вместе с Г. Лондоном для объяснения электродинамических свойств сверхпроводников предложил феноменологическую теорию сверхпроводимости. Ввел (1935) представление, что энергетическая щель определяет сверхпроводящие свойства металлов. Постулировал макроскопическую когерентность сверхпроводящего состояния для однородных сверхпроводников. В 1950 г. предсказал квантование магнитного потока. Ввел понятие глубины проникновения поля в сверхпроводник и вывел для нее уравнение.

12. КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ ТВЕРДОГО ТЕЛА, СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ

12.1. Свободные электроны в металлах и полупроводниках. Распределение Ферми-Дирака. Краткая теория

Взаимодействие атомов приводит к образованию не только молекул, но и макроскопических тел в конденсированном состоянии твердых тел и жидкостей. К образованию конденсированного состояния вещества приводят три типа сил: электростатические силы, обменные силы и силы Ван-дер-Ваальса. Простейшей формой конденсированного состояния является кристалл. Характерное свойство кристалла состоит в регулярности расположения в нем атомов. Центры атомов образуют идеальную периодическую структуру, которая называется кристаллической решеткой. Кристалл состоит из повторяющихся микроскопических частей. Тремя семействами переллельных плоскостей кристалл можно разбить на одинаковые параллелепипеды (элементарные ячейки), содержащие одинаковое количество одинаково расположенных атомов. Симметрию решетки кристалла по отношению к смещениям называют трансляционной симметрией. Величины и направления трех ребер элементарной ячейки задают три вектора, называемых основными периодами решетки. Было показано, что существуют 14 типов кристаллических решеток, которые называются решетками Браве (см. Рис. 36. Решетки Браве делятся на 7 кристаллических систем или сингоний: триклинная, моноклинная, ромбическая, тетрагональная, тригональная, гексагональная, кубическая.

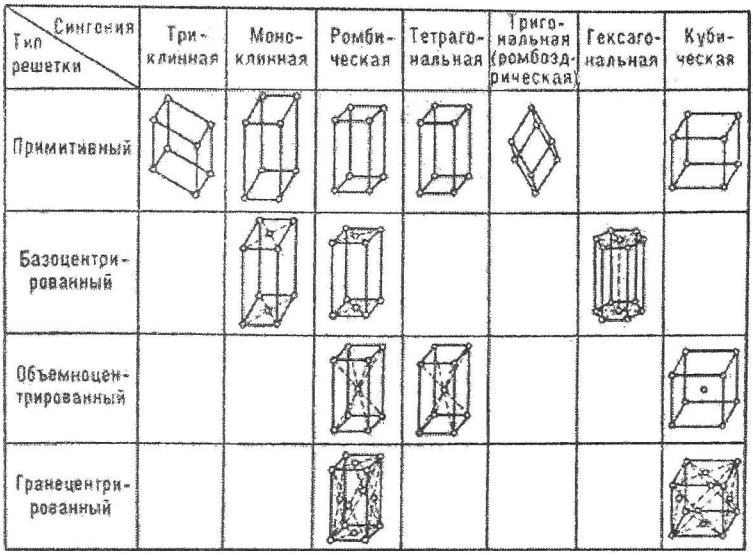

Рис. 36. Трехмерные решетки Браве.

Применение методов квантовой механики оказалось очень плодотворным при объяснении многих свойств твердых тел, которые нельзя было понять на основе классической теории. Как и во многих других случаях квантовая механика открыла возможность не только качественного, но и количественного описания важнейших закономерностей, вытекающих из особенностей структуры твердого тела.

Электроны твердого тела движутся в электрическом поле атомных ядер, а также взаимодействуют между собой. Среди различных методов приближенного рассмотрения общей сложной задачи движения таких электронов оказался весьма плодотворным метод одноэлектронного приближения. Согласно этому методу движение многих электронов заменяется движением одного электрона в поле заданного эффективного потенциала, учитывающего наряду с полем ядер частично и взаимодействие с остальными электронами.

Электроны всех атомов, образующих кристалл, должны считаться коллективизированным достоянием ядер или ионов, образующих кристаллическую решетку. Во многих случаях (электропроводность, теплопроводность кристалла) можно считать, что электроны, находящиеся во внутренних за-

мкнутых оболочках атомов, прочно связаны с ядром. Их наличие сводится лишь к экранирующему действию зарядов ядер. Можно считать коллективизированными только внешние электроны, находящиеся в неполностью заполненных оболочках. Эти электроны называют электронами проводимости. Будем также предполагать, как мы делали в случае многоэлектронного атома, что взаимодействие между электронами отсутствует. В этом случае мы вводим концепцию самосогласованного поля, которое в отличие от поля одного атома уже не будет центрально-симметричным, но будет обладать симметрией кристаллической решетки. Структура решетки такова, что положение ядер атомов может быть получено путем повторения элементарной ячейки. В силу этой особенности (трансляционной инвариантности) мы можем определить структуру кристалла, зная структуру лишь одной ячейки. Введем вектор решетки

$$\mathbf{n} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3, \tag{381}$$

где $\mathbf{a}_i$ орты декартовой системы координат, n_i целые числа. Трансляционная структура кристалла проявляется в неизменности его структуры относительно смещений на вектор $\mathbf{n}$.

Волновая функция одноэлектронной задачи должна удовлетворять стационарному уравнению Шредингера

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{r})\right]\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \quad V(\mathbf{r}+\mathbf{n}) = V(\mathbf{r}). \tag{382}$$

Из периодической структуры кристалла вытекает ряд общих свойств волновой функции электрона. Введем оператор трансляции $T_\mathbf{n}$:

$$T_\mathbf{n}\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}+\mathbf{n}). \tag{383}$$

Из этого свойства оператора трансляции и периодичности потенциала $V(\mathbf{r}+\mathbf{n}) = V(\mathbf{r})$ следует, что оператор трансляции коммутирует с гамильтонианом и имеет с ним одинаковые волновые функции:

$$(H-E)\psi = 0, \quad (T_\mathbf{n} - t_\mathbf{n})\psi = 0, \quad T_\mathbf{n}\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}+\mathbf{n}) = t_\mathbf{n}\psi(\mathbf{r}). \tag{384}$$

Из условия нормировки волновой функции следует, что для собственных значений оператора трансляции $|t_\mathbf{n}| = 1$. Поэтому мы запишем собственное значение оператора трансляции в виде

$$t_\mathbf{n} = e^{i\phi(\mathbf{n})}, \tag{385}$$

где $\phi(\mathbf{n})$ - вещественная функция. Так как трансляция на вектор $\mathbf{n}$ есть совокупность независимых трансляций по трем осям, то функция $\phi(\mathbf{n})$ должна быть линейной скалярной функцией:

$$\phi(\mathbf{n}) = (\mathbf{kn}) = k_1 n_1 + k_2 n_2 + k_3 n_3. \tag{386}$$

Таким образом получаем, что

$$t_{\mathbf{n}} = e^{i\mathbf{kn}}, \tag{387}$$

где $\mathbf{k}$ - некоторый постоянный вектор, а $\hbar\mathbf{k}$ называется квазиимпульсом. Следовательно, состояние электрона в кристалле можно характеризовать собственным значением оператора трансляции - квазиимпульсом:

$$T_n \psi_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r}) = \psi_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r}+\mathbf{n}) = e^{i\mathbf{kn}} \psi_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r}), \tag{388}$$

где λ обозначает другие квантовые числа. Вектор $\mathbf{k}$ является характерным для данной волновой функции, поэтому он указан в виде индекса внизу. Энергия E должна быть функцией $E = E(\mathbf{k})$. Нахождение этой зависимости представляет собой одну из важнейших задач физики твердого тела. Нахождение собственных функций оператора трансляции связано с решением уравнения Шредингера. Однако общий вид волновой функции можно найти, не решая уравнения Шредингера. Для этого достаточно заметить, что

$$\hat{T}(\mathbf{n}) e^{i\mathbf{kr}} = T(\mathbf{n}) e^{i\mathbf{kr}}, \quad T(\mathbf{n}) = e^{i\mathbf{kn}} \tag{389}$$

Но это не единственный возможный вид собственной волновой функции. Если умножить $e^{i\mathbf{kr}}$ на произвольную периодическую функцию $u(\mathbf{r}+\mathbf{n}) = u(\mathbf{r})$, то такое произведение тоже будет собственной волновой функцией оператора трансляции. Поэтому далее представим волновую функцию электрона в виде:

$$\psi_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{kr}} u_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r}). \tag{390}$$

Функции вида (390) называются функциями Блоха. Они представляют собой плоские модулированные волны. Функция $u_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r})$ является периодической:

$$u_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r}+\mathbf{n}) = u_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r}). \tag{391}$$

Для функции $u_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r})$ получаем следующее уравнение:

$$\left\{ \frac{\hbar^2}{2m} (\nabla + i\mathbf{k})^2 + E_\lambda(\mathbf{k}) - V(\mathbf{r}) \right\} u_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r}) = 0. \tag{392}$$

Это уравнение достаточно решить для одной элементарной ячейки. Периодические граничные условия позволяют продолжить эти решения в соседние ячейки. В случае свободного движения $\hbar\mathbf{k}$ переходит в истинный импульс. В общем случае функция Блоха не является собственной для оператора импульса. Квазиимпульс определяется неоднозначно, а с точностью до преобразования

$$\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{g}, \quad \mathbf{g} = 2\pi\mathbf{t}, \quad \mathbf{t} = m_1\mathbf{b}_1 + m_2\mathbf{b}_2 + m_3\mathbf{b}_3, \tag{393}$$

где m_i целые числа. Вектор $\mathbf{t}$ называется вектором обратной решетки, а $\mathbf{b}_i$ базисные векторы обратной решетки, которые связаны с базисными векторами прямой решетки $\mathbf{a}_i$ следующим образом:

$$\mathbf{b}_1 = \frac{[\mathbf{a}_2\mathbf{a}_3]}{V_0}, \quad \mathbf{b}_2 = \frac{[\mathbf{a}_3\mathbf{a}_1]}{V_0}, \quad \mathbf{b}_3 = \frac{[\mathbf{a}_1\mathbf{a}_2]}{V_0}, \quad V_0 = |[\mathbf{a}_1[\mathbf{a}_2\mathbf{a}_3]]|. \tag{394}$$

Из определения векторов следует, что

$$\mathbf{a}_i\mathbf{b}_j = \delta_{ij}, \quad e^{i\mathbf{k}'\mathbf{n}} = e^{i\mathbf{k}\mathbf{n}}e^{i\mathbf{G}\mathbf{n}} = e^{i\mathbf{k}\mathbf{n}} \tag{395}$$

Это означает, что состояния, характеризуемые вектором $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}'$ физически эквивалентны и энергия электрона, находящегося в этих двух состояниях должна быть одной и той же (энергия является периодической функцией квазиимпульса):

$$E(\mathbf{k} + \mathbf{g}) = E(\mathbf{k} + 2\pi\mathbf{t}) = E(\mathbf{k}). \tag{396}$$

Для однозначного определения квазиимпульса обычно отбирается его наименьшее значение, то есть квазиимпульс $\mathbf{k}$ рассматривается только в пределах первой ячейки обратной решетки, линейные размеры которой умножены на 2π. Эта ячейка носит название зоны Бриллюэна.

Одной из важнейших особенностей движения электрона в периодическом поле является зонная структура энергетического спектра. В случае свободного движения электрона волновая функция Блоха переходит в обычную плоскую волну, а энергия электрона связана с импульсом $\hbar\mathbf{k}$ обычным соотношением: $E(\mathbf{k}) = \hbar^2k^2/2m$. В общем случае движения электрона в периодическом поле энергия $E(\mathbf{k})$ уже не является всюду непрерывной функцией импульса. Вместо этого $E(\mathbf{k})$ распадается на ряд зон или полос, то есть энергия непрерывна в широких областях $\hbar\mathbf{k}$ и претерпевает разрывы при определенных значениях $\mathbf{k}$. Весь энергетический спектр разбивается при этом на ряд зон, так называемых разрешенных значений

энергии, разделенных энергетическими щелями - областями запрещенных значений энергии.

Для понимания многих процессов в твердом теле большую ценность представляют приближенные методы установления общего характера зависимости $E(\mathbf{k})$. Воспользуемся методом теории возмущений для установления зависимости $E(\mathbf{k})$ в общем виде. Существуют два приближения при решении задачи о движении электрона в периодическом поле, отличающиеся выбором нулевого приближения. Рассматривая в качестве нулевого приближения свободную частицу и периодическое поле как возмущение, придем к теории квазисвободного электрона. Если за нулевое приближение взять электрон в изолированных атомах, из которых построена решетка кристалла, то придем к теории квазисвязанного электрона. Мы рассмотрим первую теорию.

Представим гамильтониан электрона, движущегося в периодическом поле в виде

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}(\mathbf{r}) = \hat{H}_0 + \hat{W}(\mathbf{r}), \quad \hat{W}(\mathbf{r}) = \hat{V}(\mathbf{r}). \tag{397}$$

Спектр энергии свободного электрона и его уровни энергии известны:

$$\psi^0_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{kr}}. \quad E^0 = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}. \tag{398}$$

Для нахождения энергии и собственных функций в первом приближении необходимо вычислить ряд матричных элементов:

$$W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = \int \psi^{*\,0}_{\mathbf{k}'} V(\mathbf{r}) \psi^0_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \tag{399}$$

Матричные элементы отличны от нуля только для определенных значений $\mathbf{k}$, $\mathbf{k}'$. Действительно, так как $V(\mathbf{r})$ - периодическая функция с периодами $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$, $\mathbf{a}_3$, то ее можно разложить в тройной интеграл Фурье:

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{l_1,l_2,l_3=-\infty}^{\infty} c_{l_1 l_2 l_3} e^{i2\pi\left(\frac{l_1 x}{a_1} + \frac{l_2 y}{a_2} + \frac{l_3 z}{a_3}\right)} = \sum_{\mathbf{b}} c_{\mathbf{b}} e^{i2\pi(\mathbf{br})}, \quad \mathbf{b} = l_1\mathbf{b}_1 + l_2\mathbf{b}_2 + l_3\mathbf{b}_3. \tag{400}$$

Тогда матричные элементы оператора возмущений примут вид:

$$W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{b}} c_{\mathbf{b}} e^{i2\pi(\mathbf{br})} e^{i(\mathbf{kr})} = \sum_{\mathbf{b}} c_{\mathbf{b}} \delta_{\mathbf{k}',\mathbf{k}+2\pi\mathbf{b}}. \tag{401}$$

Поправки первого порядка к уровням энергии определяются диагональными матричными элементами $W_{\mathbf{k}\mathbf{k}}$ и не зависят от $\mathbf{k}$. В первом порядке

спектр энергии не изменяется при наложении периодического поля, если не считать, что все уровни смещаются на одну и туже величину, соответствующую глубине потенциальной ямы. Поправка к энергии во втором порядке может быть записана в виде:

$$E^{(2)}(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{k}'} \frac{|V_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}|^2}{E^0(\mathbf{k}) - E^0(\mathbf{k}')} = \sum_{\mathbf{b}} \frac{|c_{\mathbf{b}}|^2}{E^0(\mathbf{k}) - E^0(\mathbf{k} + 2\pi\mathbf{b})}. \qquad (402)$$

Если $E^0(\mathbf{k}) \gg E(\mathbf{k} + 2\pi\mathbf{b})$, $E^0(\mathbf{k}) \ll E(\mathbf{k} + 2\pi\mathbf{b})$, то поправки к уровням энергии малы. Волновая функция имеет при этом вид:

$$\psi^{(1)}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \psi^0_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + \sum_{\mathbf{b}} \frac{c_{\mathbf{b}}}{E^0(\mathbf{k}) - E^0(\mathbf{k} + 2\pi\mathbf{b})} \psi^0_{\mathbf{k}+2\pi\mathbf{b}}(\mathbf{r}). \qquad (403)$$

При этих же условиях возмущение мало меняет волновую функцию. Однако необходимо рассмотреть случай, когда разность $(E^0(\mathbf{k}) - E^0(\mathbf{k} + 2\pi\mathbf{b})$ сравнима с $|c_{\mathbf{b}}|^2$. В этом случае свободное движение электрона сильно возмущено. Это возмущение оказывается максимальным, когда знаменатель обращается в нуль. При точном равенстве $E^0(\mathbf{k}) = E^0(\mathbf{k} + 2\pi\mathbf{g})$ состояние является вырожденным, так как одной и той же энергии соответствуют две разные функции $\psi^0_{\mathbf{k}}$ и $\psi^0_{\mathbf{k}+2\pi\mathbf{g}}$. Это означает, что необходимо решать задачу, учитывая вырождение.

В соответствии с теорией возмущений для вырожденного состояния волновая функция в нулевом приближении имеет вид:

$$\psi^0(\mathbf{r}) = \alpha\psi^0_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + \beta\psi^0_{\mathbf{k}+2\pi\mathbf{g}}(\mathbf{r}), \qquad (404)$$

где α, β - неизвестные коэффициенты, имеющие один порядок для вырожденных состояний. Подставляя данную волновую функцию в уравнение Шредингера

$$(\hat{H}^0 + V(\mathbf{r}))\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \qquad (405)$$

получим следующее уравнение:

$$\alpha E^0(\mathbf{k})\psi^0_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + \beta E^0(\mathbf{k} + 2\pi\mathbf{g})\psi^0_{\mathbf{k}+2\pi\mathbf{g}}(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\psi^0(\mathbf{r}) = E\psi^0(\mathbf{r}). \qquad (406)$$

Перепишем это уравнение, введя новые обозначения:

$$\psi^0_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \psi_1, \quad \psi^0_{\mathbf{k}+2\pi\mathbf{g}}(\mathbf{r}) = \psi_2, \quad E^0(\mathbf{k}) = E_1, \quad E^0(\mathbf{k} + 2\pi\mathbf{g}) = E_2, \qquad (407)$$

$$\alpha E_1\psi_1 + \beta E_2\psi_2 + V(\alpha\psi_1 + \beta\psi_2) = E(\alpha\psi_1 + \beta\psi_2). \qquad (408)$$

Умножая это уравнение последовательно на ψ_1^* и ψ_2^* и интегрируя по $\mathbf{r}$, получим систему уравнений для нахождения α, β:

$$\alpha E_1 + \alpha V_{11} + \beta V_{12} = E\alpha, \tag{409}$$

$$\beta E_2 + \alpha V_{21} + \beta V_{22} = E\beta,$$

Чтобы эта однородная система уравнений имела решение, ее определитель должен быть равен 0:

$$det \begin{pmatrix} (E_1 + V_{11} - E) & V_{12} \\ V_{21} & (E_2 + V_{22} - E) \end{pmatrix} = 0 \tag{410}$$

Решая это уравнение и учитывая $V_{11} = V_{22} = 0$, получим значение энергии системы:

$$E = \frac{E_1 + E_2}{2} \pm \sqrt{\frac{(E_1 - E_2)^2}{4} + V_{12}V_{21}}. \tag{411}$$

Переходя к старым обозначениям, можеи записать:

$$E^{(1)}(\mathbf{k}) = \frac{E^0(\mathbf{k}) + E^0(\mathbf{k} + 2\pi\mathbf{g})}{2} \pm \sqrt{\frac{(E^0(\mathbf{k}) - E^0(\mathbf{k} + 2\pi\mathbf{g}))^2}{4} + |V_\mathbf{g}|^2}. \tag{412}$$

Мы видим, что при наложении возмущения энергия $E^0(\mathbf{k})$ терпит разрыв в точке, где $E^0(\mathbf{k}) = E^0(\mathbf{k} + 2\pi\mathbf{g})$. Для этих точек $E(\mathbf{k}) = E^0(\mathbf{k}) \pm |V_\mathbf{g}|$. Величина разрыва равна $2|V_\mathbf{g}|$.

Исследуем те состояния, в которых энергия терпит разрыв. Условие разрыва можно переписать в виде:

$$E^0(\mathbf{k}) - E^0(\mathbf{k} + 2\pi\mathbf{g}) = \frac{\hbar^2}{2m}\left[4\pi^2\mathbf{g}^2 + 4\pi(\mathbf{kg})\right] = 0, \quad (\mathbf{k} + \pi\mathbf{g}, \mathbf{g}) = 0. \tag{413}$$

Это условие имеет наглядный геометрический и физический смысл. Оно означает, что векторы $\mathbf{g}$ и $\mathbf{g} + \pi\mathbf{k}$ ортогональны. Построим вектор $2\pi\mathbf{g}$. Поместим начало отсчета волнового вектора $\mathbf{k}$ в точку, совпадающую с концом вектора $2\pi\mathbf{g}$. Проведем через середину вектора $2\pi\mathbf{g}$ перпендикулярную ему плоскость B_1B_2. Любой вектор в этой плоскости перпендикулярен $\mathbf{g}$. Любой вектор в этой плоскости можно представить как сумму $\pi\mathbf{g}$ и $\mathbf{k}$. Векторы $\mathbf{k}$, которые оканчиваются на плоскости B_1B_2 удовлетворяют условию ортогональности. Таким образом, чтобы найти все возможные значения $\mathbf{k}$, удовлетворяющие условию ортогональности, необходимо задать все векторы $\mathbf{g}$. Для этого надо

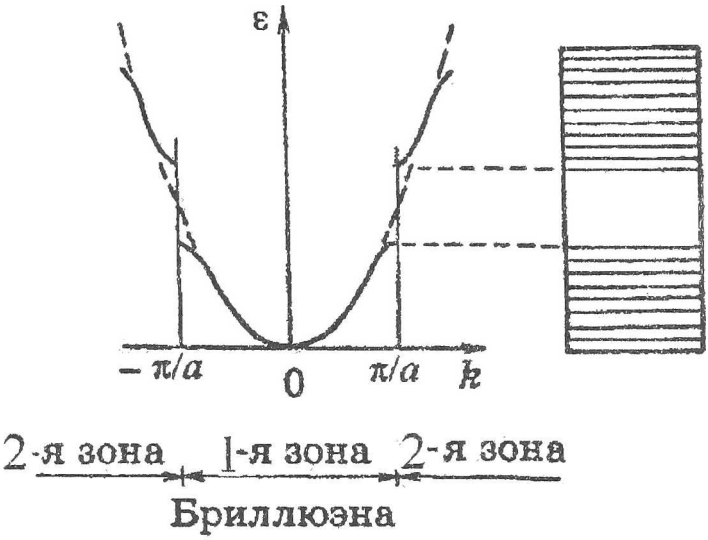

Рис. 37. Зависимость энергии для случая почти свободных электронов.

1. Построить обратную решетку с базисом $2\pi\mathbf{b}_1$, $2\pi\mathbf{b}_2$, $2\pi\mathbf{b}_3$, наложенную на пространство $\mathbf{k}$.

2. Изо всех узлов решетки провести векторы $2\pi\mathbf{g}$ в начало координат $\mathbf{k} = 0$.

3. Тогда совокупность плоскостей, проходящих через середины векторов $2\pi\mathbf{g}$ и перпендикулярных к ним определит все векторы $\mathbf{k}$, которые удовлетворяют условию $E^0(\mathbf{k}) = E^0(\mathbf{k} + 2\pi\mathbf{g})$.

Уравнение ортогональности позволяет построить зоны Бриллюэна для любого кристалла по его обратной решетке. На Рис. 38 показано построение зон Бриллюэна для плоской квадратной решетки.

Вырождение энергии будет наблюдаться для состояний, лежащих на границах зон Бриллюэна, и это те самые состояния, для которых должно наблюдаться вульф-брэгговское отражение. Двум различным значениям энергии будут соответствовать две различные комбинации волновых функций $\psi^0_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ и $\psi^0_{\mathbf{k}+2\pi\mathbf{g}}(\mathbf{r})$ в виде их суммы и разности. Семма двух волн представляет собой одну волну, идущую в направлении вектора $\pi\mathbf{g} + \mathbf{k}$, то есть вдоль границы зоны Бриллюэна, которая параллельна соответству-

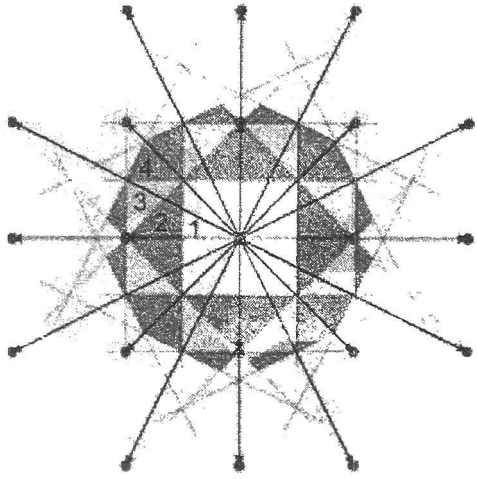

Рис. 38. Зоны Бриллюэна для плоской квадратной решетки. Для простой квадратной (кубической) решетки обратная решетка также является простой квадратной (кубической) решеткой.

ющим атомным плоскостям кристалла. Следовательно, вследствие вульф-брэгговского отражения падающая и отраженная волны интерферируют. В направлениях перпендикулярных атомным плоскостям возникают стоячие волны. Бегущие волны могут быть только вдоль атомных плоскостей.

Для понимания многих физических явлений, происходящих в твердых телах, необходимо иметь представление о методе описания колебаний решетки. В нагретом теле атомы совершают хаотические тепловые колебания относительно положений равновесия, амплитуда которых зависит от температуры. Электроны, двигаясь в веществе, могут обмениваться энергией с атомами.Благодаря колебаниям решетки устанавливается термодинамическое равновесие между решеткой и электронным газом, которое характеризуется определенной температурой. Энергия колебаний решетки или энергия упругих волн в твердом теле квантуется точно также, как энергия электромагнитного поля в полости. Квант энергии упругой волны называется фононом. Среднее число фононов определяется Функцией распределения Планка (Бозе-Эйнштейна).Число фононных колебаний, приходящихся на на данную частоту равно:

$$Z(\omega) = \frac{3V}{2\pi^2 v^3}\omega^2, \tag{414}$$

где v - скорость упругой волны, фактор $3/2$ по сравнению с электромагнитным полем введен для того, чтобы учесть как поперечные, так и продольные волны в твердом теле. Фононный спектр обрезается на максимальной частоте колебаний, которая называется дебаевской частотой ω_D. Она определяется из условия, чтобы полное число мод равнялось числу степеней свободы:

$$3N = \int_0^{\omega_D} d\omega Z(\omega) = \frac{V}{2\pi^2 v^3}\omega_D^3,\ \omega_D = \left(\frac{6\pi^2 N v^3}{V}\right)^{1/3},\ Z(\omega) = 9N\frac{\omega^2}{\omega_D^3}. \tag{415}$$

Полная упругая энергия в твердом теле имеет вид:

$$U(\tau) = \frac{9N\tau^4}{(\hbar\omega_D)^3}\int_0^{x_D} dx\frac{x^3}{e^x - 1}, x_D = \frac{\hbar\omega_D}{\tau} = \frac{\theta}{\tau}, \tag{416}$$

где $\theta = \hbar\omega_D/k$ - дебаевская температура. При малых температурах T интеграл вычисляется аналитически, и упругая энергия тела пропорциональна T^4 (закон Дебая):

$$U(\tau) = \frac{3\pi^4 NkT^4}{5\theta^3}. \tag{417}$$

Потенциальную энергию решетки со смещенными атомами можно выразить в виде функции от смещения атомов $\mathbf{u_{nj}}$:

$$U = U_0 + \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{nj},\mathbf{n'j'}} A_{\mathbf{nj},\mathbf{n'j'}}\mathbf{u_{nj}}\mathbf{u_{n'j'}} + ... \tag{418}$$

Если смещения малы, то кубичными членами в разложении энергии можно пренебречь. Наиболее просто состояние кристалла описывается в нормальных или главных координатах. Переходя к нормальным координатам, функцию Гамильтона кристалла можно представить в виде:

$$H = T + U = \sum_\alpha H_\alpha + U_0, \quad H_\alpha = \frac{1}{2}\dot{\mathbf{q}}_\alpha^2 + \frac{1}{2}\omega_\alpha^2\mathbf{q}_\alpha^2. \tag{419}$$

Полная энергия колебаний решетки складывается из энергий нормальных колебаний (сумма энергий гармонических осцилляторов). После квантования этой энергии в рамках квантовой механики получим, что энергия решетки (колебательная энергия кристалла) может быть представлена в виде:

$$E = U_0 + \sum_\alpha \hbar\omega_\alpha(v_\alpha + \frac{1}{2}). \tag{420}$$

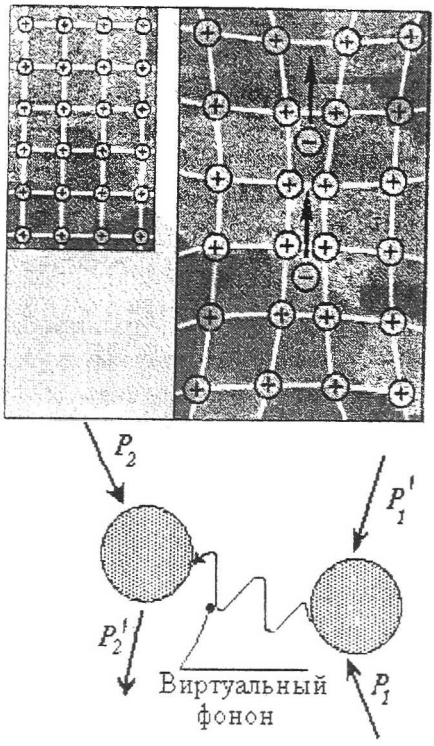

Рис. 39. Эффективное взаимодействие электронов в кристалле.

Квант энергии $\hbar\omega_n$ называется квантом энергии колебаний решетки или фононом. Целые числа n_q представляют собой число фононов с определенной частотой и энергией.

При изучении вопросов электропроводности металлов взаимодействие электронов проводимости с фононами приобретает важнейшую роль. Теоретический анализ показал, что взаимодействие между электронами и колебаниями решетки может вызвать дополнительное взаимодействие между электронами. При определенных условиях это взаимодействие будет давать притяжение между электронами. Если такое притяжение окажется сильнее кулоновского отталкивания электронов, то в металле возникнет эффективное притяжение между электронами, результатом которого будет

сверхпроводящее состояние.

Рассмотрим взаимодействие электронов через колебания решетки. Пусть T=0, фононы отсутствуют. Свободный электрон с импульсом $\mathbf{p}_1$ распространяется по кристаллу. В какой-то момент он испустил фонон (возбудил колебание решетки) и перешел в состояние $\mathbf{p}_1'$. Обозначая импульс фонона $\mathbf{q}$ запишем закон сохранения импульса: $\mathbf{p}_1 = \mathbf{p}_1' + \mathbf{q}$. Почти в тот же момент этот фонон поглотит другой электрон с импульсом $\mathbf{p}_2$: $\mathbf{p}_2 + \mathbf{q} = \mathbf{p}_2'$. Произошло рассеяние электронов друг на друге (эффективное взаимодействие): $\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 = \mathbf{p}_1' + \mathbf{p}_2'$ (см. Рис. 39).

В момент перехода электрона из начального состояния $\mathbf{p}_1$ в конечное $\mathbf{p}_1'$ возникает колебание электронной плотности с частотой $\omega = (\epsilon(\mathbf{p}_1) - \epsilon(\mathbf{p}_1'))/hbar$. Предположим, что произошло локальное увеличение плотности электронов. Ионы начнут притягиваться к этому месту, и даже после компенсации избытка электронов будут продолжать движение из-за большой массы. Произойдет перекомпенсация и появится избыточный положительный заряд. Тогда второй электрон начнет притягиваться к этому месту, возникнет эффективное притяжение между электронами. Такое притяжение может возникнуть, если колебания решетки происходят в фазе с колебаниями электронной плотности, что будет вслучае $\omega < \omega_D$ (ω - частота вынуждающей силы). Переход электрона из $\mathbf{p}_1$ в $\mathbf{p}_1'$ возможет только вблизи поверхности Ферми. Таким образом, в основе теории Бардина-Купера-Шриффера лежит следующий закон взаимодействия между электронами через фононы: электроны, энергии которых отличаются от энергии электрона на поверхности Ферми не более чем на $\hbar\omega_D$ притягиваются друг к другу. Их энергия взаимодействия равно $(-V)$. Все остальные электроны не взаимодействуют. Сверхпроводимость - свойство многих проводников, состоящее в том, что их электрическое сопротивление скачком изменяется до нуля при охлаждении ниже некоторой температуры $T_{\text{кр}}$. При переходе проводника в сверхпроводящее состояние происходит образование куперовских пар электронов с результирующим спином равным 0, и их бозе-конденсация (см. Рис. 40), в результате чего в энергетическом спектре свободных электронов в области уровня Ферми, возникает щель запрещенных значений энергии.

12.2. Примеры решения задач

Задача 1. *Найти зависимость энергии Ферми (химического по-*

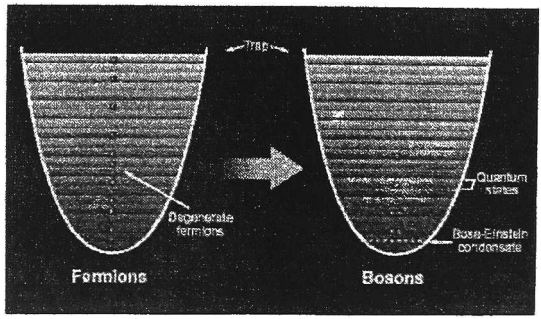

Рис. 40. Бозе-конденсация куперовских пар.

тенциала) от температуры при условии постоянства концентрации свободных электронов

Решение:

Фазовым пространством называют воображаемое пространство, по координатным осям которого откладывают координаты x, y, z и импульсы p_x, p_y, p_z электрона. Число электронов находящихся в элементе фазового объема $d\Gamma = d\mathbf{r}d\mathbf{p}$ пропорционально величине объема и зависит от точки $(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ фазового пространства. Это число определяется некоторой функцией $F(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$:

$$dN = F(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)d\Gamma, \quad N = \int_{V_\Gamma} F(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)d\Gamma \tag{421}$$

Функция $F(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ определяет число электронов в единице фазового объема. Вместо нее можно ввести функцию $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = F(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)/N$, которая будет определять вероятность нахождения одного электрона в единичном объеме фазового пространства. Условие

$$\int_{V_\Gamma} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)d\Gamma = 1 \tag{422}$$

называют условием нормировки. С помощью функции распределения можно вычислять средние значения произвольной физической величины.

Для равновесного состояния функция распределения электронов по

энергиям имеет вид (распределение Ферми-Дирака):

$$f(E,T) = \frac{1}{e^{\frac{E-F}{kT}} + 1}, \tag{423}$$

где f(E,T) представляет собой вероятность того, что состояние с энергией E занято электроном. F - энергия Ферми (химический потенциал), то есть максимальная энергия, которую имеют электроны в металле при температуре абсолютного нуля. Уровень Ферми отделяет занятые энергетические состояния от свободных. При $T > 0$ и $E \gg F$ распределение Ферми-Дирака переходит в классическое распределение Больцмана. В условиях высокой концентрации электронов проводимости в металлах (равной $10^{22} \div 10^{23}$ част/см^3), каждый из них экранирован от взаимодействия ионного остова кристалла множеством других электронов. Поэтому притяжение со стороны ионных остовов и отталкивание со стороны других электронов в среднем компенсируется, и электроны проводимости внутри металла с хорошей точностью могут считаться свободными. В рамках такой теории состояние электрона характеризуется его импульсом $\mathbf{p}$ и ориентацией спина. В условиях термодинамического равновесия электроны занимают энергетические уровни в соответствии с распределением Ферми-Дирака. Энергия свободного электрона $E = \mathbf{p}^2/2m$. Число состояний с импульсами $p \div p + dp$ равно

$$N(p)dp = 2\frac{4\pi p^2 dp V}{h^3} \tag{424}$$

Отюда можно получить число состояний с энергией $E \div E + dE$ в единице объема:

$$N(E)dE = 4\pi \left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} \sqrt{E} dE. \tag{425}$$

Концентрация электронного газа равна:

$$n = \int_0^\infty N(E) f(E,T) dE = 4\pi \left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} \int_0^\infty \sqrt{E} dE \frac{1}{e^{\frac{E-F}{kT}} + 1}. \tag{426}$$

При абсолютном нуле интегрирование по энергии можно выполнить аналитически:

$$n(T=0) = 4\pi \left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} \int_0^F \sqrt{E} dE = \frac{8\pi}{3} \left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} F(T=0)^{3/2} \tag{427}$$

Разрешая это соотношение относительно энергии Ферми, получим:

$$F(T=0) = F_0 = \frac{h^2}{2m}\left(\frac{3n}{8\pi}\right)^{2/3} \tag{428}$$

В случае $T > 0$ концентрация электронов определяется следующим выражением:

$$n(T>0) = 4\pi\left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2}\int_0^\infty \sqrt{E}dE\frac{1}{e^{\frac{E-F}{kT}}+1}. \tag{429}$$

Воспользуемся следующей формулой для представления результата интегрирования:

$$\int_0^\infty \phi(E)\frac{1}{e^{\frac{E-F}{kT}}+1} \approx \psi(F) + \frac{\pi^2}{6}(kT)^2\phi'(F), \tag{430}$$

где $\psi(E)$ -первообразная для функции $\phi(E)$. Считая, что концентрация электронов постоянна, находим зависимость химического потенциала от температуры и электронной плотности в виде:

$$F = F_0\left[1 - \frac{\pi^2}{12}\frac{(kT)^2}{F_0^2}\right]. \tag{431}$$

Задача 2. *Получить с помощью формулы для концентрации свободных электронов с энергией E*

$$n(E)dE = f(E)g(E)dE = \frac{\sqrt{2m^3}}{\pi^2\hbar^3}\frac{\sqrt{E}dE}{e^{\frac{E-E_f}{kT}}+1} \tag{432}$$

выражение для максимальной кинетической энергии $T_{\text{макс}}$ свободных электронов в металле при $T = 0^o\ K$, если их концентрация равна n. Вычислить $T_{\text{макс}}$ для серебра, полагая, что на каждый атом приходится один свободный электрон.

Решение:

Максимальная кинетческая энергия электронов совпадает с энергией Ферми при T = 0:

$$T_{max} = F_0 = \frac{\hbar^2}{2m}\left(3\pi^2 n\right)^{3/2} \tag{433}$$

Для численной оценки этой энергии необходимо найти концентрацию электронов для серебра n. Она связана с плотностью серебра $\rho(Ag)$ и массой одного атома m_{Ag}: $n = \frac{\rho}{m_{Ag}}$. Из условия задачи следует, что концентрация свободных электронов совпадает с концентрацией атомов. Следовательно,

$$T_{\max} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(3\pi^2\frac{\rho(Ag)}{m_{Ag}}\right)^{3/2} = \frac{0.6582^2\cdot 10^{-30}4\pi^2\cdot 9\cdot 10^{20}}{2\cdot 0.511\cdot 10^6}\times \left(\frac{10.5\cdot 9\cdot 10^{20}}{1.6\cdot 10^{-12}\cdot 107\cdot 939\cdot 10^6}\right)^{2/3} \approx 5.1 \text{ эВ}. \tag{434}$$

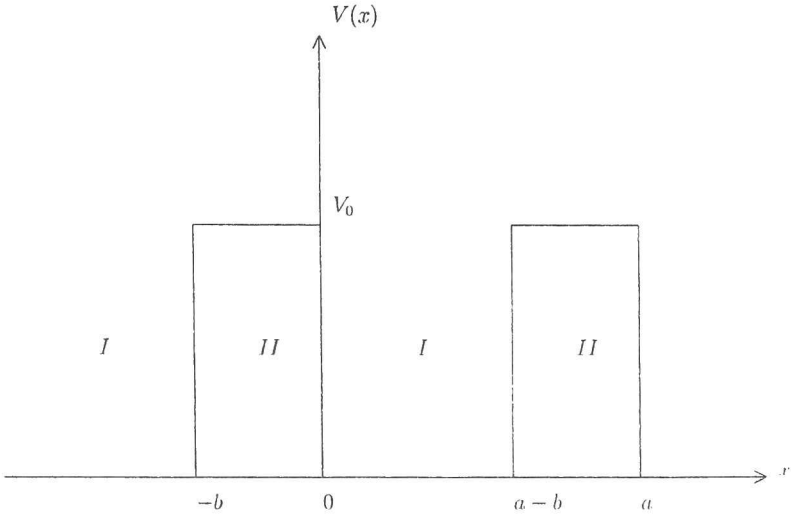

Рис. 41. Потенциал Кронига-Пенни.

Задача 3. *Модель Кронига-Пенни. Рассмотреть движение электронов в периодическом поле потенциала, показанного на Рис. 41. Показать, что энергетический спктр обнаруживает зонную структуру.*

Решение:

Решение уравнения Шредингера выберем в виде:

$$\psi_1(x) = Ae^{i\alpha x} + Be^{-i\alpha x}, \quad \alpha = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \tag{435}$$

в области, где потенциальная энергия равна нулю и

$$\psi_2(x) = Ce^{\beta x} + De^{-\beta x}, \quad \alpha = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \tag{436}$$

в области барьера высоты V_0. Условие сшивания функций и ее производных на границах (-b), 0, (a-b) имеют вид:

$$\psi_2(0) = \psi_1(0), \quad \psi_2'(0) = \psi_1'(0). \tag{437}$$

$$\psi_2(-b) = e^{-i\lambda a}\psi_1(a-b), \quad \psi_2'(-b) = e^{-i\lambda a}\psi_1'(a-b), \tag{438}$$

где λ - действительная величина. Использовалось общее свойство волновых функций в периодическом поле, подчиняющихся закону трансляции: $\psi(x+a) = e^{ika}\psi(x)$. В результате получаем систему уравнений для определения A, B, C, D, λ:

$$C + D = A + B, \quad C - D = i\frac{\alpha}{\beta}(A - B), \tag{439}$$

$$Ce^{-\beta b} + De^{\beta b} = e^{-i\lambda a}\left[Ae^{i\alpha(a-b)} + Be^{-i\alpha(a-b)}\right],$$

$$Ce^{-\beta b} - De^{\beta b} = i\frac{\alpha}{\beta}e^{-i\lambda a}\left[Ae^{i\alpha(a-b)} - Be^{-i\alpha(a-b)}\right]$$

Из этих равенств можно получить:

$$(A+B)[\mathrm{ch}(\beta b) - e^{-i\lambda a}\cos\alpha(a-b)] = i(A-B)[\frac{\alpha}{\beta}\mathrm{sh}(\beta b) + e^{-i\lambda a}\sin\alpha(a-b)] \tag{440}$$

$$(A+B)[\mathrm{sh}(\beta b) - \frac{\alpha}{\beta}e^{-i\lambda a}\sin\alpha(a-b)] = i(A-B)[\frac{\alpha}{\beta}\mathrm{ch}(\beta b) - \frac{\alpha}{\beta}e^{-i\lambda a}\cos\alpha(a-b)]. \tag{441}$$

Эти уравнения совместны, если определитель равен нулю, поэтому получаем следующее уравнение:

$$\cos\lambda a = \frac{\beta^2 - \alpha^2}{2\alpha\beta}\,\mathrm{sh}\,\beta b\sin\alpha(a-b) + \mathrm{ch}\,\beta b\cos\alpha(a-b). \tag{442}$$

Отсюда графическим методом можно определить энергетический спектр, имея ввиду, что правая часть равенства по модулю не превышает 1. С целью упрощения будем рассматривать предел при $b \to 0$, $V_0 \to \infty$, считая, что величина площади под барьером остается постоянной:

$$P = \frac{mV_0}{\hbar^2}ab. \tag{443}$$

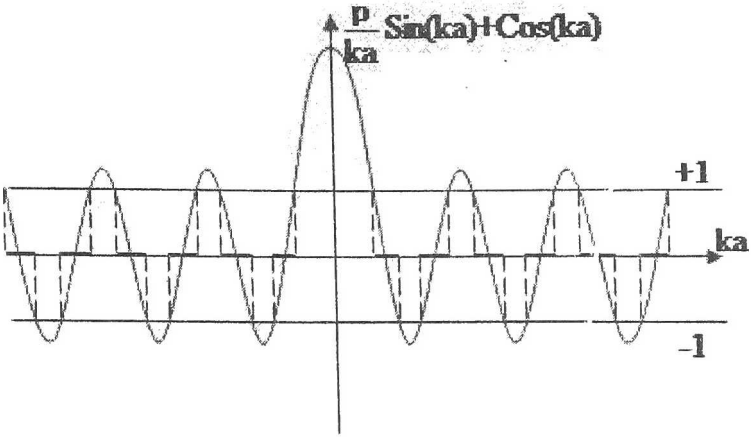

Рис. 42. Допустимые значения энергии в модели Кронига-Пенни. $ka = \alpha a$.

В этом приближении $\mathrm{sh}\,\beta b \approx \beta b$, $\mathrm{ch}\,\beta b \approx 1$ получаем следующее уравнение, решение которого представлено на Рис. 42:

$$\cos \lambda a = P\frac{\sin \alpha a}{\alpha a} + \cos \alpha a. \tag{444}$$

Поскольку λ - действительное число, то правая часть должна меняться в пределах от (-1) до (+1). Следовательно, в этом примере спектр обнаруживает зонную структуру — чередование разрешенных и запрещенных полос энергии.

12.3. Задачи для самостоятельного решения

1. Найти долю свободных электронов в металле при $T = 0^o\ K$, кинетическая энергия которых больше половины максимальной.

2. Для металлов уровень Ферми определяется выражением:

$$E_f = E_{f0}\left[1 - \frac{\pi^2}{12}\frac{k^2T^2}{E_{f0}^2}\right], \quad E_{f0} = \frac{\hbar^2}{2m}(3\pi^2 n)^{2/3}, \tag{445}$$

где E_{f0} - уровень Ферми при $T = 0^o\ K$. Часто при расчетах пренебрегают различием значений E_f и E_{f0}. Оценить, на сколько процентов

отличается E_f от E_{f0} для вольфрама при температуре, близкой к его температуре плавления. Считать, что на каждый атом приходится два свободных электрона.

3. Используя распределение Ферми-Дирака, доказать, что средняя энергия электрона при $kT \ll F_0$определяется следующим выражением:

$$< E >= \frac{3}{5}F_0\left(1+\frac{5\pi^2}{12}\frac{(kT)^2}{F_0^2}\right). \tag{446}$$

4. Температурой вырождения электронного газа называется величина

$$T_F = \frac{F}{k}. \tag{447}$$

При $T < T_F$ электронный газ проявляет принципиально квантовые свойства. При $T \gg T_F$ квантовые свойства практически отсутствуют. Вычислить температуру вырождения для серебра.

5. Найти число свободных электронов, приходящихся на один атом меди при $T = 0^oK$, если энергия Ферми $E_F = 7.0$ эВ. Плотность меди равна 8.96 г/см^3

6. Найи наиболее вероятную и среднюю скорости свободных электронов в золоте при температуре $T = 0^oK$, если известно,что их концентрация равна $5.90 \cdot 10^{22}$ см$^{-3}$

7. Найти максимальную скорость электронов в алюминии при $T = 0^oK$, если концентрация свободных электронов $18.06 \cdot 10^{22}$ см$^{-3}$

8. Оцените энергию Ферми свободных электронов в меди при $T = 0^oK$, считая, что на один атом приходится один свободный электрон. Плотность меди принять равной 8.96 г/см^3

9. Концентрация свободных электронов в металлическом натрии $n = 2.5 \ \ 10^{22}$ см$^{-3}$ Найти давление электронного газа p. Показать, что $p = \frac{2}{3}E$, где E объемная плотность кинетической энергии.

10. Концентрация свободных электронов в металле со скоростью в интервале $(\mathbf{v} \div \mathbf{v} + d\mathbf{v})$ определяется следующим выражением:

$$n(\mathbf{v}d\mathbf{v} = 2\left(\frac{m}{2\pi\hbar}\right)^3 \frac{d\mathbf{v}}{1+e^{\frac{E-E_F}{kT}}}. \tag{448}$$

Получить эту формулу, используя выражение для концентрации свободных электронов с энергией в интервале $(E \div E + dE)$.

11. Решетка Бравэ это бесконечная периодическая структура, образованная дискретными точками и имеющая абсолютно одинаковый пространственный порядок и ориентацию независимо от того, какую ее точку мы принимаем за исходную. Трехмерная решетка Бравэ образована всеми точками с радиусами-векторами вида

$$\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3, \tag{449}$$

где $\mathbf{a}_i$ - любые три вектора, не лежащие в одной плоскости, n_i - целые числа. Множество волновых векторов $\mathbf{K}$ называют обратной решеткой, если плоская волна с $\mathbf{k} = \mathbf{K}$ имеет периодичность данной решетки Бравэ (прямой решетки), то есть справедливы равенства:

$$e^{i\mathbf{K}(\mathbf{r}+\mathbf{R})} = e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}}, \quad e^{i\mathbf{K}\mathbf{R}} = 1, \tag{450}$$

при всех $\mathbf{R}$ принадлежащих решетке Бравэ.

Показать, что обратной решеткой по отношению к простой кубической решетке Бравэ со стороной a является простая кубическая решетка с кубической элементарной ячейкой со стороной $2\pi/a$.

12.4. Биографическое примечание

- **Блох**, Феликс (23.10.1905 -10.09.1983) швейцарский физик. Работы посвящены ядерному магнитному резонансу (Нобелевской премии по физике за 1952 год), теории твердого тела, торможению заряженных частиц в веществе.

- **Бриллюэн**, Леон Николя (18.08.1889 4.10.1969) французский и американский физик, основатель современной физики твёрдого тела. Работы посвящены теории рассеяния света, квантовой механики, квантовой теории твердого тела.

13. ОТВЕТЫ И УКАЗАНИЯ К РЕШЕНИЯМ

Тема 1.

1. Длина волны, соответствующая максимуму функции $f(\lambda, T)$, увеличилась в 1.9 раза.

2. Зная, что давление теплового излучения p=u/3, где u-плотность энергии излучения, найти:

   a) Давление теплового излучения во внутренних областях Солнца равно $p = 4\sigma T^4/3c$=$1.6 \cdot 10^4$ ГПа.

   b) Температура T полностью ионизированной водородной плазмы $T = (3c\rho k/2\sigma m)^{1/3}$= $1.9 \cdot 10^7$ K.

3. Число фотонов равно $3.2 \cdot 10^{18}$

4. a) Наиболее вероятная частота излучения равна $\omega_{\text{вер}} = 3T/a = 0.785 \cdot 10^{15}$ с^{-1}.

   b) Средняя частота излучения равна $\omega_{\text{ср}} = 4T/a = 1.05 \cdot 10^{15}$ с^{-1}

5. Число собственных поперечных колебаний струны длиной l в интервале частот $(\omega. \omega + d\omega)$ равно $dZ = (l/\pi v)d\omega$.

6. Числовое значение постоянной b в законе смещения Вина равно $b = 2\pi\hbar c/x_0 k = 0.29$ см K, где x_0 корень уравнения $1 - x_0/5 = e^{-x}$, $x_0 \approx 5$.

7. a) Число фотонов в 1 см^3 в спектральных интервалах $(\omega, \omega + d\omega)$ и $(\lambda, \lambda + d\lambda)$ соттветственно равно:

$$n_\omega d\omega = \frac{1}{\pi^2 c^3} \frac{\omega^2 d\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}, n_\lambda d\lambda = \frac{8\pi}{\lambda} \frac{d\lambda}{e^{\frac{2\pi\hbar c}{kT\lambda}} - 1}$$

   б) Полное число фотонов равно $n = 0.243(kT/\hbar c)^3 = 5.5 \cdot 10^8$ см^{-3}

8. a) Наиболее вероятная энергия фотонов равна $\hbar\omega_{\text{вер}} = 1.6 \cdot kT = 0.14$ эВ.

   б) Средняя энергия фотонов равна $2.7 \cdot kT = 0.23$ эВ.

9. Использовать критерий Вина для объемной спектральной плотности энергии и записать условие максимума этой функции.

10. Наиболее вероятнуая длина волны в спектре теплового излучения с энергетической светимостью M равна : $\lambda_m = b(\sigma/M)^{1/4}$.

11. Установившаяся температура в полости 2 равна $T_2 = T_1\sqrt{r/l}$=0.28 kK.

12. Число собственных поперечных колебаний прямоугольной мембраны равно $dZ_\omega = (S/2\pi v^2)\omega d\omega$.

13. Мощность излучения единицы поверхности абсолютно черного тела $\Delta W = 0.6$ Вт/см^2

14. Числовое значение постоянной Стефана-Больцмана равно $\sigma = (\pi^2/60)k^4/c^2\hbar^3$.

15. Температура теплового излучения $T = 2.33c\hbar k < \lambda >= 2.0\ kK$.

16. Удалось зарегистрировать изменение частоты фотона $\Delta\nu = 8.8 \cdot 10^{-35}\ c^{-1}$

Тема 2.

1. Электрон должен двигаться со скоростью $2.8 \cdot 10^8$ м/с.

2. Частота фотонов, испускаемых под углом 45^o равна $\nu_{45} = \nu_0[1 - \frac{v}{c}(1 - \cos\theta)$.

3. В таком пучке света содержится 10 фотонов.

4. Длина волны $\lambda_0 = (2\pi\hbar c/A)(\eta - n)/(\eta - 1)$=0.26 мкм.

5. Записать законы сохранения энергии и импульса и показать, что они ведут к противоречию.

6. Длина волны падающего излучения $\lambda = (2\pi\hbar/mc)(\sqrt{1 + 2mc^2/T_{max}} - 1) = 2.0$ пм.

7. Энергия налетающего фотона равна $\hbar\omega = \frac{1}{2}T[1 + \sqrt{1 + 2mc^2T}\ \overline{\sin^2(\theta/2)}]$=0.94 МэВ.

8. Сила светового давления, которую испытывает пластинка, равна $F = P/[2c(1 - l^2/R^2)]$.

9. Длина волны коротковолновой границы сплошного рентгеновского спектра равна $\lambda = \Delta\lambda\eta/(\eta - 1)$=0.10 нм.

10. Максимальный потенциал шарика равен $V = (2\pi\hbar c/\lambda - A)/e$=1.74 В.

11. Максимальная кинетическая энергия фотоэлектронов, вырванных с поверхности лития электромагнитным излучением, равна $T_{max} = \hbar(\omega + \omega_0) - A$=0.38 эВ.

12. Кинетическая энергия фотоэлектрона равна $T = \frac{pc}{1+2(p/mc)\sin^2(\theta/2)} - E_{св}$=31 кэВ.

13. γ-квант рассеялся на угол 29^o

14. а) Комптоновское смещение длины волны рассеянного электрона равно $\lambda - \lambda' = \frac{4\pi\hbar}{mc}\sin^2\frac{\theta}{2}$=1.2 пм.

    б) Кинетическая энергия электрона до столкновения равна $T = \frac{2\eta^2\sin^2(\theta/2)}{1+2\eta\sin^2(\theta/2)}mc^2$=0.17 МэВ.

15. Сила светового давления, которую оказывает плоский световой поток равна $F = \frac{dp}{dt} = \int \Delta p dN_\omega = 2(I/c)\cos^2\theta$=0.05 мкН.

16. Ортопозитроний — связанное состояние электрона и позитрона. Использовать законы сохранения энергии-импульса.

Тема 3.

1. Минимальное расстояние, на которое протон приблизится к покоящемуся ядру атома ртути равно $r_{min} = \frac{3}{2}\frac{Ze^2}{T}$.

2. Скорость электрона на второй боровской орбите можно определить, используя уравнение движения $mv^2/r = Ze^2/r^2$ и формулу для радиусов боровских орбит. Энергия связи электрона на второй боровской орбите $E_2 = \mu(Ze^2)^2/8\hbar^2$.

3. Имеются также следующие спектральные линии 0.657 мкм, 0.487 мкм, 0.434 мкм.

4. Скорость отдачи атома равна $v = c(\sqrt{1 + 3\hbar R/2mc^2} - 1) \approx 3.24$ м/с.

5. Энергия, необходимую для удаления обоих электронов, равна 79 эВ.

6. Радиус первой боровской орбиты $r_1 = \hbar^2/Zme^2$. Скорость электрона на первой боровской орбите $v_1 = Ze^2/\hbar$. Эти величины для первой боровской орбиты ионов He^+, Li^{++} соответственно равны: $r_1(He) = 0.264\cdot10^{-8}$ см, $r_1(Li) = 0.176\cdot10^{-8}$ см, $v_1(He) = 4.38\cdot10^6$ м/с, $v_1(Li) = 6.57\cdot10^6$ м/с.

7. Расстояние между частицами в основном состоянии $1.06 \cdot 10^{-8}$ см. Ионизационный потенциал 6.8 В. Первый потенциал возбуждения 5.1 В. Постоянная Ридберга $1.03 \cdot 10^{16}$ с$^{-1}$ Длина волны резонансной линии 0.243 мкм.

8. Разрешенные радиусы орбит $r_n = \sqrt{(\hbar/m\omega)n}$. Уровни энергии частицы $E_n = n\hbar\omega$.

9. Кинетическая энергия альфа-частиц 0.9 МэВ.

10. Число $\alpha-$частиц, рассеянных под углами превышающими $\theta_o = 60^o$, равно $1.6 \cdot 10^5$

11. Водород испускает $N = \frac{1}{2}n(n-1) = 45$ линий.

12. Скорость электронов равна $2.3 \cdot 10^6$ м/с.

13. Скорость сближения равна 0.29 с.

14. Использовать формулу для уровней энергии и радиусов орбит водородоподобного атома

15. Разрешенные значения энергии $E = n\hbar\omega$.

16. Энергия связи электрона равна 54.5 эВ (He^+).

17. Решение задачи можно найти в книге А. Зоммерфельда «Теория атома и спектры».

Тема 4.

1. Кинетическая энергия электронов равна $T = (2/m)(\pi\hbar l/d\Delta x)^2 = 24$ эВ.

2. Межплоскостное расстояние равно $d = \pi\hbar k/(2mT)^{1/2}\sin\theta$=2.3 А, $tg2\theta = r/l$.

3. Использовать условие дифракционных максимумов для щели.

4. Неопределенность скорости электрона в атоме водорода $\Delta v = 10^6$ м/с. Скорость электрона на первой боровской орбите $v_1 = 2.2 \cdot 10^6$ м/с.

5. Записать полную энергию частицы и условие ее минимума. Минимальная возможная энергия частицы $E_{min} = \hbar\omega$.

6. Для оценки промежутка времени использовать формулу зависимости ширины пакета от времени.

7. Энергия частицы равна $E_n = (\pi^2\hbar^2/2ml^2)n^2$

8. Функция распределения молекул по дебройлевским длинам волн $f(\lambda) \sim \lambda^{-4}e^{-2\lambda_m/\lambda^2}$, $\lambda_m = \pi\hbar/(mkT)^{1/2}$.

9. Межплоскостное расстояние равно $d = \pi\hbar k/(2mT)^{1/2}\cos\alpha$/2-2.1 А.

10. Внутренний потенциал монокристалла серебра $V_i = (\pi\hbar k)^2/2mde^2 - V\sin^2\theta$= 15 эВ.

11. Наименьшие ошибки скоростей электрона, протона и атома урана равны $v_1 \sim 2 \cdot 10^4$ см/с, $v_2 \sim 10$ см/с, $v_3 \sim 5 \cdot 10^{-2}$ см/с.

12. Сила давления частицы на стенки $F \sim 2E_{min}/l$.

13. Ширина щели $d \approx (2\hbar l/mv)^{1/2} = 10^{-3}$ см.

14. Неопределенность координаты частицы больше ее дебройлевской длины волны в $2 \cdot 10^3$ раз.

15. Длина волны де Бройля протона и электрона может быть вычислена по формуле $\lambda = h/(2m_{e,p}T)^{1/2}$

16. Записать поперечный импульс, который приобретает электрон при прохождении объектива. Неопределенность координаты электрона считать равной d.

17. Записать квантовое условие Бора и длину волны де Бройля.

Тема 5.

1. Собственные функции и собственные значения операторов: $\psi = Ce^{i\lambda x}$, $\lambda = 2\pi n/a$; $\psi = c\sin(\sqrt{\lambda}x)$, $\lambda = (\pi n/l)^2$

2. Сопряженные операторы имеют вид: $p_x\hat{\cdot}\, x$, $-\hat{i}p_x$.

3. Использовать определения эрмитовости и коммутативности операторов.

4. Использовать определение сопряженного оператора.

5. Средние значения кинетической и потенциальной энергии осциллятора равны $< T >= \pi^2\alpha^2/2m = < U >= \hbar\omega/4$.

6. Возможные собственные значения оператора L_z равнв $0, \pm 2\hbar$; их вероятности 2/3 и 1/6.

7. Использовать определение сопряженного оператора.

8. Для средних значений находим:

$$\bar{x} = x_0, \quad \bar{x^2} = \frac{a^2}{2} + x_0^2, \quad (\bar{\Delta x})^2 = \bar{x^2} - \bar{x}^2 = \frac{a^2}{2}$$

$$\bar{p} = p_0, \quad \bar{p^2} = \frac{\hbar^2}{2a^2} + p_0^2, \quad (\bar{\Delta p})^2 = \frac{\hbar^2}{2a^2}$$

9. Определить сопряженные операторы для указанных операторов.

10. Собственные значения оператора L_z равны $0, \pm\hbar, \pm 2\hbar$; их вероятности 36/70, 16/70, 1/70.

11. Средняя кинетическая энергия частицы $< T >= \frac{2}{3}\frac{\pi^2\hbar^2}{ml^2}$.

12. Собственные функции и собственные значения равны: $\Psi_f = C\exp[-\frac{(x-f)^2}{2}]$, f- любое комплексное число. Такие функции неортогональны.

13. Волновая функция ротатора в момент времени t равна $\Psi(\phi, t) = \frac{A}{2}(1 + \cos 2\phi e^{i2\hbar t/I})$.

14. Вычислить несколько производных по λ следующей функции: $f(\lambda) = e^{\lambda\hat{A}}\hat{B}e^{-\lambda\hat{A}}$.

15. Собственные функции и собственные значения матричного оператора σ_z равны $\binom{1}{0}$, +1; $\binom{0}{1}$, -1

16. Выполнить преобразование Фурье собственных волновых функций операторов координаты и импульса, полученных в координатном представлении.

Тема 6.

1. а) Вероятность ее пребывания в основном состоянии $256/27\pi^2$

   б) На n-уровне : $240(\pi n)^{-6}(1-(-1)^n]^2$. Значения вероятности для первых трех уровней 0.999, 0, 0.001

2. Найти коэффициенты разложения указанных волновых функций по собственным функциям оператора $\hat{k}$.

3. а) Сила давления $F = \pi^2\hbar^2/ml^3$ b) Работа, которую необходимо совершить, чтобы медленно сжать яму в η раз равна $A = (\eta^2-1)\pi^2\hbar^2/2ml^3$

4. Собственные значения энергии частицы $E_{n_1n_2n_3} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m}(\frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} + \frac{n_3^2}{c^2})$.

5. Коэффициент прозрачности ямы $D = \left(1 + \frac{U_0 \sin^2(k_0 l)}{4E(E+U_0)}\right)^{-1}$.

6. Вероятность прохождения частицы $D = exp\left(-(\pi l)/\hbar)\sqrt{2m/U_0}(U_0 - E)\right)$.

7. Уровень энергии: $E_0 = -m\alpha^2/2\hbar^2$. Нормированная волновая функция $\psi_0 = \sqrt{\kappa_0}exp(-\kappa_0|x|)$, $\kappa_0 = \alpha m/\hbar^2$.

8. Решение временного уравнения Шредингера для свободной частицы, имеющей импульс p, имеет вид: $\psi(\mathbf{r}, t) = Ae^{(i\mathbf{pr}-i\omega t)}$.

9. Энергия основного состояния $E_1 = \pi^2\hbar^2/18ma^2$

10. Собственные волновые функции совпадают с волновыми функциями гармонического осциллятора при нечетных n, $E_{n'} = \hbar\omega(2n' + \frac{3}{2})$, n'=0,1,2...

11. Эффективная глубина проникновения частицы под барьер равна $x_{eff} = \frac{1}{2k}$, $k = \sqrt{2m(U_0 - E)}/\hbar$.

12. Вероятность прохождения частицы сквозь потенциальный барьер равна $D = exp(-(4l\sqrt{2m}/3\hbar U_0)(U_0 - E)^{3/2})$.

13. Использовать графический метод нахождения энергии связанных состояний.

14. Вероятность пребывания ее вне классических границ поля 0.157.

15. Вероятность нахождения частицы с наименьшей энергией в области $0 < x < a/3$, $0 < y < b/3$ равна $w = (1/3 - \sqrt{3}/4\pi)^2$=0.038.

Тема 7.

1. а) Постоянные равны $a = \alpha = -1/2r_1 = -me^2/2\hbar$, $E = -me^2/8\hbar$

   b) Нормировочный коэффициент $A = (8\pi r_1^3)^{-1/2}$, r_1 -первый боровский радиус.

2. Считать все оси равноправными, а проекции момента равновероятными.

3. Радиальная часть вероятности местоположения электрона в атоме водорода имеет максимум при $r_{2P} = 4r_1$, $r_{3D} = 9r_1$, где $r_1 = a_0$-первый боровский радиус.

4. Среднее значение квадрата момента импульса равно $2\hbar^2$

5. а) Наиболее вероятное расстояние от ядра $r_{\text{вер.}} = r_1$, вероятность нахождения электрона в области $r < r_{\text{вер.}}$ равна 32.3%

   б) Вероятность нахождения его вне классических границ поля 23.8%

6. Средний электростатический потенциал, создаваемый $1S$ -электроном в центре атома водорода равен $(-e/r_1)$.

7. Сдвиг уровня энергии основного состояния водородоподобного атома равен $\Delta E_0 = \frac{2}{3} Z^4 (\frac{R}{a_0})^2 \frac{e^2}{a_0}$.

8. Сила, действующая на атом равна $F = \mu_B 2I/cr^2 = 3 \cdot 10^{-26}$ Н

9. Использовать оператор Лапласа в сферических координатах.

10. Вектор ϵ удовлетворяет условию: $|\epsilon|^2 = 3/4\pi$.

11. Волновые функции стационарных состояний и уровни энергии плоского ротатора равны: $\psi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}$, $E_m = \frac{\hbar^2 m^2}{2I}$. Уровни энергии двукратно вырождены за исключением основного состояния m 0.

12. Энергетические уровни частицы дискретного спектра равны $E_N = -\mu\alpha^2/2\hbar^2(N-1/2)^2$, $N = n_\rho + |m| + 1$. Кратность вырождения уровней $g(N) = 2N - 1$.

13. Значения $E_{n_r l}$ энергетических уровней частицы в дискретном спектре при фиксированном значении l с увеличением n_r увеличиваются; при фиксированном значении n_r с увеличением l тоже увеличиваются.

14. Приближенное значение энергии основного состояния частицы в кулоновском потенциальном поле $U(r) = -\alpha/r$ равно $E_0 = -0.42\frac{\mu\alpha^2}{\hbar^2}$

Тема 8.

1. Полные механические моменты электронных оболочек атомов в состоянии ^4P: $\hbar\sqrt{32}$, $\hbar\sqrt{52}$, $\hbar\sqrt{72}$; в состоянии ^5D: 0, $\hbar/\sqrt{2}$, $\hbar/\sqrt{6}$, $\hbar/\sqrt{12}$, $\hbar/\sqrt{20}$.

2. Кратность вырождения этого состояния по J равна 10 (это число состояний с различными m_J).

3. Число электронов в атомах: а) 15; б) 46.

4. Основной терм атома $^3F_2$, $^4F_{3/2}$.

5. Основной терм $^5D_4$. Кратность вырождения (2J+1)=9.

6. Возможные термы атомов, содержащих кроме заполненных оболочек: a) два электрона, s и p: $^1P_1$, $^3P_{0,1,2}$; b) два электрона, p и d: $^1P_1$, $^1D_2$, $^1F_3$, $^3P_{0,1,2}$, $^3D_{1,2,3}$, $^3F_{2,3,4}$

7. Спектральный символ основного состояния данного атома $^4F_{3/2}$.

8. Электронная конфигурация серы S: $1s^22s^22p^63s^23p^4$ ($^3P_2$); хлора Cl: $1s^22s^22p^63s^23p^5$ ($^3P_{3/2}$)

9. Возможные термы атомов, содержащих кроме заполненных оболочек три электрона s,p,d: $^2P_{1/2,3/2}$, $^2D_{3/2,5/2}$, $^2F_{5/2,7/2}$, $^4P_{1/2,3/2,5/2}$, $^4D_{1/2,3/2,5/2,7/2}$, $^4F_{3/2,5/2,7/2,9/2}$.

10. Спиновый механический момент атомов в этих состояниях $p_s \geq \hbar\sqrt{2}$, $p_s = \hbar\sqrt{2}$

11. Электронная конфигурация данной подоболочки и основной терм атома: d^5, S=3/2, L=0, $^6S_{5/2}$.

12. Основное состояние атома ванадия $^4F_{3/2}$.

13. а) два d-электрона, б) пять p-электронов, в) пять d-электронов.

14. Использовать явный вид оператора $\hat{s}_z$ и решить уравнение на собственные значения.

15. Квантовые дефекты s, p, d - термов равны 1.376, 0.883, 0.010; длина волны головной линии 1140 нм.

16. Поправка a_K=2.84, a_L=10.

17. Получить собственные функции операторов $\mathbf{S}^2$ и S_z для системы трех частиц, обладающих спином 1/2.

18. а) Кинетическая энергия обоих электронов $T_{\text{фот}} = 4.7$ кэВ, $T_{\text{Оже}} = 10.4$ кэВ. б) Длину волны λ=50 нм.

19. Использовать выражение для энергии магнитного момента в магнитном поле $\Delta V = -(\boldsymbol{\mu}\mathbf{H})$.

20. При усреднении спин-орбитального оператора по волновым функциям использовать теорему сложения моментов.

Тема 9.

1. Пучок атомов расщепится на пять компонент.

2. Множитель Ланде для атомов: а) 2 (S); 2/3, 4/3 (P); 4/5, 6/5 (D); б) 0/0 в состоянии $^3P_0$, 3/2 ($^3P_1$,$^3P_2$); в) g=2 за исключением синглетного, где g=0/0; г) g=1

3. Спектральное обозначение терма а) $^2F_{5/2}$, б) $^3D_3$.

4. Магнитный момент и возможные значения проекции магнитного момента атома: а) $2\sqrt{3}\mu_B$ б) $2\sqrt{3/5}\mu_B$.

5. S=3, мультиплетность этого терма равна 7.

6. Угловые скорости прецессии а) $0.88\cdot10^{10}$, $1.17\cdot10^{10}$, 0 рад/с. б) $1.32\cdot10^{10}$ рад/с ($^3P_2$).

7. Выразить скалярные произведения операторов моментов через их собственные значения.

8. Модуль магнитного момента атома $\sqrt{12/5}\mu_B$ $\mu_J = 0, \pm1, \pm2, \pm3$

9. Пучок расщепится на 4 компоненты.

10. Максимальное значение силы взаимодействия между атомом и этим током равно $F = 2\pi I R^2 z\mu_B/c(R^2+z^2)^{5/2} = 4.1\cdot10^{-22}$ дин.

11. Градиент напряженности магнитного поля равен $\partial B/\partial z = mv^2\delta/a(a+2b)\mu_B$=7 кГс/см.

12. а) 0.6, 5, 6 магнетонов Бора; b) Пучок атомов расщепляется на пять компонент, на ноль компонент.

13. Расстояние между крайними компонентами пучка равно 5 мм.

14. Для обоих термов g=0; $\boldsymbol{\mu}_J \perp \mathbf{J}$

15. Модули магнитных моментов, обусловленных движением электронов: $|\mu_L| = \sqrt{3}\mu_B$, $|\mu_S| = 2\sqrt{3}\mu_B$, $|\mu| = 3\sqrt{3/2}\mu_B$.

16. Угловая скорость вращения цилиндра $\omega = 2N|1|/I$.

Тема 10.

1. Смещения (в единицах $\mu_B B/\hbar$) зеемановских компонент спектральной линии ${}^2D_{5/2} \to {}^2P_{3/2}$ равны: $\Delta\omega = \pm(1, 3, 15, 17, 19, 21)/15$.

2. а) Не расщепится, б) Расщепится на шесть компонент, в) Не расщепится (g=0).

3. а) Простой эффект, б) Сложный эффект, в) Простой эффект.

4. а) Смещения зеемановских компонент в единицах $\mu_B B/\hbar$ равны: $\Delta\omega = 5/3, 3/3, 1/3, -1/3, -3/3, -5/3$, b) Интервал между крайними компонентами 0.78 см$^{-1}$

5. В обоих случаях три компоненты.

6. Смещения (в единицах $\mu_B B/\hbar$) равны $\pm(0, 1, 2)/6$.

7. Магнитный момент атомов Ni (в состоянии ${}^3F$) равен $\mu = 5.6\mu_B$ ($J = 4$)

8. Минимальная разрешающая способность $\lambda/\delta\lambda = 3\pi c\hbar/\lambda\mu_B B = 2.7 \cdot 10^5$

9. Аномальный эффекта Зеемана переходит в нормальный, так как сильное поле разрывает связь между спиновым и орбитальным моментами.

10. Напряженность магнитного поля равна $H = 2\pi\hbar c\Delta T/\mu_B(5g_D - 3g_P) = 7.5$ кЭ.

11. Напряженность магнитного поля равна 5.87 кЭ.

Тема 11.

1. Квантовые числа J для соседних вращательных уровней равны 2 и 3.

2. Термы основных состояний указанных двухатомных молекул имеют вид: $^1\Sigma$ (N_2), $^1\Pi$ (F_2), $^1\Sigma$ (HCl), $^2\Pi$ (NO).

3. Механический момент молекулы кислорода имеет вид: $M = \sqrt{2E\mu d^2} = 3.46\ \hbar$.

4. Частота вращения атомов в молекулах: $\nu_{H_2} = 6.69\ \ 10^{12}$ Гц, $\nu_{O_2} = 1.87 \cdot 10^{12}$ Гц. Линейные скорости движения молекул: $v_{H_2} = 1.58$ км/с, $v_{O_2} = 0.63$ км/с. В случае молекулы H_2 имеем нулевой вращательный уровень, а для молекулы O_2 первый вращательный уровень.

5. Разность энергий диссоциации молекул водорода и дейтерия равна: $D_D - D_H = \frac{1}{2}\hbar\omega_H(1 - \sqrt{\mu_h/\mu_D})$=0.08 эВ.

6. Угловая скорость вращения молекулы S_2, находящейся в первом возбужденном состоянии, равна: $\omega = 4\sqrt{2}\hbar/md^2$=$1.57 \cdot 10^{11}$ рад/с, m-масса молекулы.

7. Энергия, соответствующую первому вращательному уровню молекулы HCL, равна 4.4 мэВ.

8. Во вращательном спектре молекул Br_2 содержится $N = \sqrt{2I\omega/\hbar}$, где ω - собственная частота их колебаний.

9. Отношение энергий, которые нужно затратить для возбуждения двухатомной молекулы на первый колебательный и первый вращательный уровни равно: $E_{\text{кол}}/E_{\text{вр}} = \omega\mu\rho^2/\hbar$. 36 ($H_2$), 170 ($HI$), 2900 ($I_2$).

10. Число вращательных уровней, расположенных между нулевым и первым возбужденным колебательными уровнями, равно 13.

Тема 12.

1. Доля свободных электронов $\eta = 1 - 2^{-3/2} \approx 0.65$

2. Температурное отличие составляет 0.1%.

3. Вычислить среднюю энергию электрона с помощью распределения Ферми-Дирака.

4. Температура вырождения для серебра составляет величину $5.8 \cdot 10^3\ K$. Эта температура существенно больше температуры плавления металла. Таким образом, при температуре металла в твердом состоянии электронный газ является вырожденным и следует применять статистику Ферми-Дирака.

5. Отношение концентрации свободных электронов к концентрации атомов меди равно 1.02.

6. Средняяскорость электронов $1.04 \cdot 10^6$ м/с. Наиболее вероятная скорость свободных электронов $1.39 \cdot 10^6$ м/с.

7. Максимальная скорость электронов равна $2.02 \cdot 10^6$ м/с.

8. Энергия Ферми свободных электронов в меди равна 7.0 эВ.

9. Давление электронного газа 5 ГПа ($5 \cdot 10^4$ атм).

10. Выполнить замену переменных в данном интеграле.

11. Использовать данные определения прямой и обратной решеток.

14. БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Шпольский Э. В. Атомная физика т.1,2, Наука, М., 1984.-552 с.
2. Сивухин Д. В. Атомная и ядерная физика, Физматлит, М., 2006.-782 с.
3. Борн М. Атомная физика, Мир, М., 1970.- 484 с.
4. Ферми Э. Лекции по квантовой механике, РХД, Ижевск, 2000.-246 с.
5. Ципенюк Ю.М. Квантовая микро- и макрофизика, Физматкнига, М., 2006.-638 с.
6. Барсуков О.А., Ельяшевич М.А. Основы атомной физики, Научный мир, М., 2006.-647 с.
7. Иродов И.Е. Квантовая физика, Бином. Лаборатория знаний, М., 2007.-256 с.
8. Матвеев А.Н. Атомная физика, Высшая школа, М., 1989.-439 с.
9. Башлачев Ю.А., Богданов Д.Л. Фундаментальные эксперименты физики, УРСС, М., 2012.-235 с.
10. Иродов И.Е. Сборник задач по атомной и ядерной физике, Энергоатомиздат, М., 1984.-215 с.
11. Савельев И.В. Сборник вопросов и задач по общей физике, АСТ Астрель, М., 2005.-319 с.
12. Маскевич С.А. Атомная физика. Практикум по решению задач, Вышейшая школа, Минск, 2010.-455 с.
13. Де Бройль Л. Избранные научные труды, т.1, Логос, М., 2010.-552 с.
14. Блохинцев Д.И. Основы квантовой механики, Наука, М., 1976.-664 с.
15. Фок В.А. Начала квантовой механики, Наука, М., 1976.-375 с.
16. Соколов А.А., Тернов И.М., Жуковский В.Ч. Квантовая механика, Наука, М., 1979.- 528 с.
17. Ахиезер А.И. Атомная физика, Наукова Думка, Киев, 1988.-267 с.

18. Фаддеев М.А., Чупрунов Е.В. Лекции по атомной физике, Физматлит, М., 2008.-612 с.

19. Будкер Д., Кимбелл Д., ДеМилль Д. Атомная физика. Освоение через задачи. Физматлит, М., 2009.-400 с.

20. Менский М.Б. Человек и квантовый мир, Век2, Фрязино, 2007.-318 с.

21. Пенроуз Р. Путь к реальности или законы, управляющие Вселенной, Регулярная и хаотическая динамика, М., 2007.-911 с.

22. Грин Б. Параллельные миры и глубинные законы космоса, УРСС, М., 2012.-394 с.

23. Горбунов Д.С., Рубаков В.А. Введение в теорию ранней Вселенной. Теория горячего Большого взрыва, УРСС, М., 2008.-543 с.

24. Тимофеевская О.Д., Хрусталев О.А. Лекции по квантовой механике, Регулярная и хаотическая динамика, М., 2007.-315 с.

25. Вайнберг С. Первые три минуты, Регулярная и хаотическая динамика, М., 2000.-269 с.

26. Белокуров В.В., Тимофеевская О.Д., Хрусталев О.А. Квантовая телепортация обыкновенное чудо, Регулярная и хаотическая динамика, Ижевск, 2000.-255 с.

27. Уиттекер Э. История теорий эфира и электричества. Современные теории 1900-1926 гг., Институт компьютерных исследований, М., 2004.-463 с.

28. Галицкий Г.М., Карнаков Б.М., Коган В.И. Задачи по квантовой механике, Наука, М., 1981.-647 с.

29. Флюгге З.Задачи по квантовой механике, Т.1, Мир, М., 1974.- 341 с.

30. Гейзенберг В. Избранные труды, УРСС, М., 2001.-614 с.

31. Джеммер М. Эволюция понятий квантовой механики, Наука, М., 1985.-379 с.

32. Peter J. Mohr, Barry N. Taylor, and David B. Newell, CODATA Recommended Values of the Fundamental Physical Constants: 2010, Reviews of Modern Physics 100, 1000 (2012).

33. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. Нерелятивистская теория, Наука, М., 1989.-767 с.

34. Бор Н. Избранные научные труды, т.2, Наука, М., 1971.-675 с.

35. Эйнштейн А. Собрание научных трудов, т.3, Наука, М., 1966.-632 с.

36. Киселев В.В. Квантовая механика, МЦНМО, М., 2009.-560 с.

37. В. А. Фок, А. Эйнштейн, Б. Подольский и Н. Розен, Н. Бор, Можно ли считать, что квантово-механическое описание физической реальности является полным?, Успехи Физических Наук, т.XVI, вып.4, с.436 (1936).

38. Давыдов А.С. Квантовая механика, Наука, М., 1973.-703 с.

39. Зоммерфельд А. Строение атома и спектры, т.1, Госиздат технико-теоретической литературы, М., 1956.-591 с.

40. Гинзбург В.Л., Левин Л.М., Рабинович М.С., Сивухин Д.В. Сборник задач по общему курсу физики. Атомная физика. Физика элементарных частиц, Физматлит, М., 2006.-184 с.

41. Ельяшевич М.А. Общие вопросы спектроскопии, УРСС, 2006.-236 с.

42. Ельяшевич М.А. Атомная спектроскопия, УРСС, 2006.-415 с.

43. Ельяшевич М.А. Молекулярная спектроскопия, УРСС, 2006.-358 с.

44. Гейзенберг В. Физика и философия. Часть и целое, Наука, М., 1989.-400 с.

45. Марков М.А. О трех интерпретациях квантовой механики, Наука, М., 1991.-112 с.

46. Киреев П.С. Физика полупроводников, Высшая школа, М., 1975.- 584 с.

47. Давыдов А.С. Теория твердого тела, Наука, М., 1976.- 639 с.

48. Квасников И.А. Введение в теорию электропроводности и сверхпроводимости, URSS, М., 2010.-216 с.

49. Демидович Б.П. Математические основы квантовой механики, Лань, М., 2005.- 197 с.

50. Зелевинский В.Г. Лекции по квантовой механике, НГУ, 2002.- 499 с.

51. Ашкрофт Н., Мермин Н. Физика твердого тела т.1, Мир, М., 1979.-309 с.

52. Толмачев В.В., Федотов А.А., Федотова С.В. Основы квантовой механики, РХД, Ижевск, 2005.-240.

15. ПРИЛОЖЕНИЯ

15.1. Таблица 1. Характеристики элементов периодической системы

Номер	Элемент	Символ	Атомная масса	Электронная конфигурация	Терм	Радиус	Потенциал ионизации, эВ
1	2	3	4	5	6	7	8
1	Водород	H	1.008	$1s$	^2S	1.5	13.599
2	Гелий	He	4.003	$1s^2$	^1S	0.927	24.588
3	Литий	Li	6.940	$2s$	^2S	3.874	5.392
4	Бериллий	Be	9.013	$2s^2$	^1S	2.649	9.323
5	Бор	B	10.81	$2p$	^2P	2.205	8.298
6	Углерод	C	12.011	$2p^2$	^3P	1.743	11.260
7	Азот	N	14.007	$2p^3$	^4S	1.447	14.534
8	Кислород	O	16.00	$2p^4$	^3P	1.239	13.618
9	Фтор	F	19.00	$2p^5$	^2P	1.085	17.423
10	Неон	Ne	20.179	$2p^6$	^1S	0.965	21.565
11	Натрий	Na	22.990	$3s$	^2S	4.209	5.139
12	Магний	Mg	24.305	$3s^2$	^1S	3.253	7.646
13	Алюминий	Al	26.98	$3p$	^2P	3.434	5.986
14	Кремний	Si	28.09	$3p^2$	^1P	2.788	8.152
15	Фосфор	P	30.974	$3p^3$	^4S	2.369	10.487
16	Сера	S	32.06	$3p^4$	^1P	2.069	10.360
17	Хлор	Cl	35.453	$3p^5$	^2P	1.842	12.968
18	Аргон	Ar	39.948	$3p^6$	^1S	1.663	15.760
19	Калий	K	39.10	$4s$	^2S	5.244	17.423
20	Кальций	Ca	40.08	$4s^2$	^1S	4.218	6.113
21	Скандий	Sc	44.96	$3d4s^2$	^2D	3.96	6.562
22	Титан	Ti	47.90	$3d^24s^2$	^3F	3.766	6.74
23	Ванадий	V	50.94	$3d^34s^2$	^4F	3.607	6.74
24	Хром	Cr	51.996	$3d^54s$	^7S	3.843	6.767
25	Марганец	Mn	54.94	$3d^54s^2$	^6S	3.349	7.434
26	Железо	Fe	55.85	$3d^64s^2$	^5D	3.242	7.870
27	Кобальт	Co	58.93	$3d^74s^2$	^4F	3.144	7.864
28	Никель	Ni	58.70	$3d^84s^2$	^3F	3.055	7.637
29	Медь	Cu	63.55	$3d^{10}4s$	^2S	3.331	7.726
30	Цинк	Zn	65.38	$3d^{10}4s^2$	^1S	2.898	9.394
31	Галлий	Ga	69.72	$4s^24p$	^2P	3.424	5.999
32	Германий	Ge	72.59	$4s^24p^2$	^3P	2.904	7.899
33	Мышьяк	As	74.92	$4s^24p^3$	^4S	2.561	9.789
34	Селен	Se	78.96	$4s^24p^4$	^3P	2.309	9.752
35	Бром	Br	79.904	$4s^24p^5$	^2P	2.112	11.814
36	Криптон	Kr	83.80	$4s^24p^6$	^1S	1.952	14.000

Продолжение таблицы 1.

Номер	Элемент	Символ	Атомная масса	Электронная конфигурация	Терм	Радиус	Потенциал ионизации, эВ
1	2	3	4	5	6	7	8
37	Рубидий	Rb	85.47	$5s$	^2S	5.632	4.177
38	Стронций	Sr	87.62	$5s^2$	^1S	4.633	5.695
39	Иттрий	Y	88.91	$4d5s^2$	^2D	4.300	6.217
40	Цирконий	Zr	91.22	$4d^25s^2$	^3F	4.078	6.634
41	Ниобий	Nb	92.91	$4d^45s$	^6D	4.207	6.759
42	Молибден	Mo	95.94	$4d^55s$	^7S	4.079	7.092
43	Технеций	Te	98	$4d^55s^2$	^6S	3.650	7.28
44	Рутений	Ru	101.1	$4d^75s$	^5F	3.877	7.366
45	Родий	Ro	102.91	$4d^85s$	^4F	3.795	7.46
46	Палладий	Pd	106.4	$4d^{10}$	^1S	1.533	8.336
47	Серебро	Ag	107.88	$4d^{10}5s$	^2S	3.656	7.576
48	Кадмий	Cd	112.41	$4d^{10}5s^2$	^1S	3.237	8.994
49	Индий	In	114.82	$5s^25p$	^2P	3.778	5.786
50	Олово	Sn	118.69	$5s^25p^2$	^3P	3.286	7.344
51	Сурьма	Sb	121.75	$5s^25p^3$	^4S	2.592	8.608
52	Теллур	Te	127.60	$5s^25p^4$	^3P	2.701	9.010
53	Иод	I	126.90	$5s^25p^5$	^2P	2.502	10.451
54	Ксенон	Xe	131.30	$5s^25p^6$	^1S	2.338	12.130
55	Цезий	Cs	132.91	$6s$	^2S	6.30	3.894
56	Барий	Ba	137.33	$6s^2$	^1S	5.25	5.212
57	Лантан	La	138.91	$5d6s^2$	^2D	4.93	5.577
58	Церий	Ce	140.12	$4f5d6s^2$	^1G	4.88	5.539
59	Празеодим	Pr	149.9	$4f^36s^2$	^4I	5.06	5.473
60	Неодим	Nd	144.24	$4f^46s^2$	^5I	5.01	5.526
61	Прометий	Pm	[145]	$4f^56s^2$	^6H	4.96	5.582
62	Самарий	Sm	150.4	$4f^66s^2$	^7F	4.91	5.644
63	Европий	Eu	151.96	$4f^76s^2$	^8S	4.86	5.670
64	Гадолиний	Gd	157.25	$4f^75d6s^2$	^9D	4.58	6.150
65	Тербий	Tb	158.93	$4f^96s^2$	^6H	4.77	5.864
66	Диспрозий	Dy	162.50	$4f^{10}6s^2$	^5I	4.73	5.939
67	Гольмий	Ho	164.93	$4f^{11}6s^2$	^4I	4.69	6.022
68	Эрбий	Er	167.26	$4f^{12}6s^2$	^3H	4.65	6.108
69	Тулий	Tm	168.93	$4f^{13}6s^2$	^2F	4.61	6.184
70	Иттербий	Yb	173.04	$4f^{14}6s^2$	^1S	4.57	6.254
71	Лютеций	Lu	174.97	$4f^{14}5d6s^2$	^2D	4.27	5.426
72	Гафний	Hf	178.49	$5d^26s^2$	^3F	4.08	6.454

Продолжение таблицы 1.

Номер	Элемент	Символ	Атомная масса	Электронная конфигурация	Терм	Радиус	Потенциал ионизации, эВ
1	2	3	4	5	6	7	8
73	Тантал	Ta	180.95	$5d^36s^2$	^4F	3.94	7.89
74	Вольфрам	W	183.85	$5d^46s^2$	^5D	3.82	7.98
75	Рений	Re	186.21	$5d^56s^2$	^6S	3.72	7.88
76	Осмий	Os	190.2	$5d^66s^2$	^5D	3.62	8.7[illegible]
77	Иридий	Ir	192.2	$5d^76s^2$	^4F	3.53	9.05
78	Платина	Pt	195.09	$5d^9ds$	^3D	3.72	8.96
79	Золото	Au	196.97	$5d^{10}6s$	^2S	3.70	9.226
80	Ртуть	Hg	200.59	$5d^{10}6s^2$	^1S	3.33	10.438
81	Таллий	Tl	204.37	$6s^26p$	^2P	3.92	6.108
82	Свинец	Pb	207.21	$6s^26p^2$	^3P	3.42	7.417
83	Висмут	Bi	208.98	$6s^26p^3$	^4S	3.08	7.285
84	Полоний	Po	[209]	$6s^26p^4$	^3P	-	8.417
85	Астат	At	[210]	$6s^26p^5$	^2P	-	9.224
86	Радон	Rn	[222]	$6s^26p^6$	^1S	2.54	10.749
87	Франций	Fr	[223]	$7s$	^2S	-	4.073
88	Радий	Ra	226.03	$7s^2$	^1S		5.279
89	Актиний	Ac	227.03	$6d7s^2$	^2D	-	5.17
90	Торий	To	232.04	$6d^27s^2$	^3F	5.00	6.08
91	Протактиний	Pa	231.04	$5f^26d7s^2$	^4K	5.35	5.89
92	Уран	U	238.03	$5f^36d7s^2$	^5L	5.08	6.194
93	Нептуний	Np	237.05	$5f^46d7s^2$	^6L	-	6.266
94	Плутоний	Pu	[244]	$5f^67s^2$	^7F	5.18	6.06
95	Америций	Am	[243]	$5f^76d7s^2$	^8S	-	5.99
96	Кюрий	Cm	[245]	$5f^76d7s^2$	^9D	-	6.02
97	Берклий	Bk	[247]	$5f^97s^2$	^8H	-	6.23
98	Калифорний	Cf	[249]	$5f^{10}7s^2$	^5I		6.30
99	Эйнштейний	Es	[254]	$5f^{11}7s^2$	^4I		6.42
100	Фермий	Fm	[253]	$5f^{12}7s^2$	^3H		6.50
101	Менделсевий	Md	[255]	$5f^{13}7s^2$	^2F		6.58
102	Нобелий	No	[255]	$5f^{14}7s^2$	^1S		6.65
103	Лоуренсий	Lr	[257]	$5f^{14}6d7s^2$	^2D		4.312
104	Резерфордий	Rf	[261]	$6d^27s^2$			
105	Дубний	Db	[262]	$6d^37s^2$			
106	Сиборгий	Sg	[263]	$6d^47s$			
107	Борий	Bh	[262]	$6d^57s$			
108	Хассий	Hs	[264]	$6d^67s$			
109	Мейтнерий	Mt	[266]	$6d^77s$			

15.2. Таблица 2. Основные физические постоянные

Величина	Символ	Значение	Единица измерения	Стандартная ошибка
1	2	3	4	5
Скорость света в вакууме	c	299792458	$м \cdot с^{-1}$	
Гравитационная постоянная	G	$6.67384(80) \cdot 10^{-11}$	$м^3 кг^{-1} с^{-2}$	$1.2 \cdot 10^{-4}$
Постоянная Планка	h	$6.62606957(29) \cdot 10^{-34}$	$Дж \cdot с$	$4.4 \cdot 10^{-8}$
	h	$4.135667516(91) \cdot 10^{-15}$	$эВ \cdot с$	$2.2 \cdot 10^{-8}$
	$\hbar$	$1.054571726(47) \cdot 10^{-34}$	$Дж \cdot с$	$4.4 \cdot 10^{-8}$
	$\hbar$	$6.58211928(15) \cdot 10^{-16}$	$эВ \cdot с$	$2.2 \cdot 10^{-8}$
Планковская масса	$m_P = (\hbar c/G)^{1/2}$	$2.17651(13) \cdot 10^{-8}$	кг	$6.0 \cdot 10^{-5}$
	$m_P c^2$	$1.220932(73) \cdot 10^{19}$	ГэВ	$6.0 \cdot 10^{-5}$
Планковская длина	$l_P = \hbar/m_P c$	$1.616199(97) \cdot 10^{-35}$	м	$6.0 \cdot 10^{-5}$
Планковское время	$t_P = l_P/c$	$5.39106(32) \cdot 10^{-44}$	с	$6.0 \cdot 10^{-5}$
Элементарный заряд	e	$1.602176565(35) \cdot 10^{-19}$	Кл	$2.2 \cdot 10^{-8}$
Магнетон Бора	$\mu_B = e\hbar/2me$	$927.400968(20) \cdot 10^{-26}$	$Дж \cdot Тл^{-1}$	$2.2 \cdot 10^{-8}$
Ядерный магнетон	$\mu_N = e\hbar/2m_p$	$5.05078353(11) \cdot 10^{-27}$	$Дж \cdot Тл^{-1}$	$2.2 \cdot 10^{-8}$
Постоянная тонкой структуры	α	$7.2973525698(24) \cdot 10^{-3}$		$3.2 \cdot 10^{-10}$
Обратная постоянная тонкой структуры	α^{-1}	137.035 999 074(44)		$3.2 \cdot 10^{-10}$
Постоянная Ридберга	$R_\infty = \frac{\alpha^2 m_e c}{2h}$	10 973 731.568 539(55)	m^{-1}	$5.0 \cdot 10^{-12}$
Радиус Бора	$a_0 = \hbar^2/m_e e^2$	$0.52917721092(17) \cdot 10^{-10}$	м	$3.2 \cdot 10^{-10}$
Постоянная Ферми	$G_F/(\hbar c)3$	$1.166364(5) \cdot 10^{-5}$	$ГэВ^{-2}$	$4.3 \cdot 10^{-6}$
Масса электрона	m_e	$9.10938291(40) \cdot 10^{-31}$	кг	$4.4 \cdot 10^{-8}$
	$m_e c^2$	0.510998928(11)	МэВ	$2.2 \cdot 10^{-8}$
Удельный заряд электрона	$-e/m_e$	$-1.758820088(39) \cdot 10^{11}$	$Кл \cdot кг^{-1}$	$2.2 \cdot 10^{-8}$
Комптоновская длина волны электрона	$\lambda_C = h/m_e c$	$2.4263102389(16) \cdot 10^{-12}$	м	$6.5 \cdot 10^{-10}$
Постоянная Стефана-Больцмана	$\sigma = \frac{\pi^2 k^4}{60\hbar^3 c^2}$	$5.670373(21) \cdot 10^{-8}$	$Вт \cdot м^{-2} K^{-4}$	$3.6 \cdot 10^{-6}$
Постоянная Вина	$b = \lambda_{max} T$	$2.8977721(26) \cdot 10^{-3}$	$м \cdot K$	$1.7 \cdot 10^{-6}$
Постоянная Авогадро	N_A	$6.02214129(27) \cdot 10^{23}$	$моль^{-1}$	$7.9 \cdot 10^{-8}$
Универсальная газовая постоянная	R	8.314 4621(75)	$Дж \cdot моль^{-1} \cdot K^{-1}$	$9.1 \cdot 10^{-7}$
Постоянная Больцмана	$k = R/N_A$	$1.3806488(13) \cdot 10^{-23}$	$Дж \cdot K^{-1}$	$1.7 \cdot 10^{-6}$
		$8.6173324(78) \cdot 10^{-5}$	$эВ \cdot K^{-1}$	$1.7 \cdot 10^{-6}$

Продолжение таблицы 2.

Величина	Символ	Значение	Единица измерения	Стандартная ошибка
1	2	3	4	5
Масса протона	m_p	$1.672621777(74) \cdot 10^{-27}$	кг	$2.2 \cdot 10^{-8}$
	m_pc^2	938.272 046(21)	МэВ	2.2×10^{-8}
Масса нейтрона	m_n	$1.674927351(74) \cdot 10^{-27}$	кг	$4.4 \cdot 10^{-8}$
	m_nc^2	939.565 379(21)	МэВ	$2.2 \cdot 10^{-8}$
Атомная постоянная массы	$m_u = \frac{1}{12}m(^{12}C)$	$1.660538921(73) \cdot 10^{-27}$	кг	4.4×10^{-8}
	m_uc^2	931.494 061(21)	МэВ	4.4×10^{-8}
Энергия Хартри	$E_h = 2R_\infty hc =$	$4.35974434(19) \times 10^{-18}$	Дж	$4.4 \cdot 10^{-8}$
	$= \alpha^2 m_e c^2$	27.211 385 05(60)	эВ	2.2×10^{-8}
Масса дейтрона	m_d	$3.34358348(15) \times 10^{-27}$	кг	$4.4 \cdot 10^{-8}$
	m_dc^2	1875.612 859(41)	МэВ	$2.2 \cdot 10^{-8}$
Масса α-частицы	m_α	$6.64465675(29) \cdot 10^{-27}$	кг	$4.4 \cdot 10^{-8}$
	$m_\alpha c^2$	3727.379 240(82)	МэВ	$2.2 \cdot 10^{-8}$
Магнитный момент электрона	$\frac{\mu_e}{\mu_B}$	$-1.00115965218076(27)$		$2.6 \cdot 10^{-13}$
Магнитный момент протона	$\frac{\mu_p}{\mu_N}$	2.792 847 356(23)		$8.2 \cdot 10^{-9}$
Магнитный момент нейтрона	$\frac{\mu_n}{\mu_N}$	-1.913 042 72(45)		$2.4 \cdot 10^{-7}$
Магнитный момент дейтрона	$\frac{\mu_d}{\mu_N}$	0.857 438 2308(72)		$8.4 \cdot 10^{-9}$
АММ электрона	$a_e = \frac{\lvert\mu_e\rvert}{\mu_B} - 1$	$1.15965218076(27) \cdot 10^{-3}$		$2.3 \cdot 10^{-10}$
АММ мюона	$a_\mu = \frac{\lvert\mu_\mu\rvert}{\frac{e\hbar}{2m_\mu}} - 1$	$1.16592091(63) \cdot 10^{-3}$		5.4×10^{-7}
Отношение масс протона и электрона	$\frac{m_p}{m_e}$	1836.152 672 45(75)		$4.1 \cdot 10^{-10}$
Отношение масс нейтрона и протона	$\frac{m_n}{m_p}$	1.001 378 419 17(45)		$4.5 \cdot 10^{-10}$
Гиромагнитный фактор электрона	$g_e = -2\frac{\mu_e}{\mu_B}$	-2.002 319 304 361 53(53)		$2.6 \cdot 10^{-13}$
Гиромагнитный фактор протона	$g_p = 2\frac{\mu_p}{\mu_N}$	5.585 694 713(46)		$8.2 \cdot 10^{-9}$
Гиромагнитный фактор нейтрона	$g_n = 2\frac{\mu_n}{\mu_N}$	-3.826 085 45(90)		$2.4 \cdot 10^{-7}$
Гиромагнитный фактор дейтрона	$g_d = \frac{\mu_d}{\mu_N}$	0.857 438 2308(72)		$8.4 \cdot 10^{-9}$
Классический радиус электрона	$r_e = \alpha^2 a_0$	$2.8179403267(27) \cdot 10^{-15}$	м	$9.7 \cdot 10^{-10}$
Сечение томсоновского рассеяния	$\sigma_e = 8\pi r_e^2/3$	$0.6652458734(13) \cdot 10^{-28}$	$м^2$	$1.9 \cdot 10^{-9}$

15.3. Таблица 3. Рекомендованные значения энергетических эквивалентов

	Дж	кг	$м^{-1}$	Гц
1 Дж	(1 Дж) = 1 Дж	$(1Дж)/c^2 = 10^{-17}$ кг× 1.112650056	$(1Дж)/hc = 10^{24}$ $м^{-1}$× 5.03411701(22)	$(1Дж)/h = 10^{33}$ Гц ×1.509190311(67)
1 кг	$(1кг)c^2$ = 8.987551787 $\times 10^{16}$Дж	(1 кг) = 1 кг	(1 кг)c/h = 4.524 438 73(20) $\times 10^{41}$$м^{-1}$	$(1кг)c^2/h$ = 1.356 392 608 (60) $\times 10^{50}$ Гц
1 $м^{-1}$	(1 $м^{-1}$)hc = 1.986 445 684(88) $\times 10^{-25}$ Дж	(1 $м^{-1}$)h/c = 2.210 218 902(98) $\times 10^{-42}$ кг	(1 $м^{-1}$) = 1 $м^{-1}$	(1 $м^{-1}$)c = 299 792 458 Гц
1 Гц	(1 Гц)h = 6.626 069 57(29) $\times 10^{-34}$ Дж	(1 Гц)h/c^2 = 7.372 496 68(33) $\times 10^{-51}$ кг	(1 Гц)/c = 3.335 640 951 $\times 10^{-9}$$м^{-1}$	(1 Гц) = 1 Гц
1 K	(1 K)k = 1.380 6488(13) $\times 10^{-23}$ Дж	(1K)k/c^2 = 1.536 1790(14) $\times 10^{-40}$ кг	(1 K)k/hc = 69.503 476(63) $м^{-1}$	(1 K)k/h = 2.083 6618(19) $\times 10^{10}$ Гц
1 эВ	(1 эВ) =	(1эВ)$/c^2$ =	(1 эВ)/hc =	(1 эВ)/h =
	1.602 176 565(35) $\times 10^{-19}$ Дж	1.782 661 845(39) $\times 10^{-36}$ кг	8.065 544 29(18) $\times 10^{5}$$м^{-1}$	2.417 989 348 (53) $\times 10^{14}$ Гц
1 а.е.м.	(1а.е.м.)c^2 = 1.492 417 954(66) $\times 10^{-10}$ Дж	(1 а.е.м.) = 1.660 538 921(73) $\times 10^{-27}$ кг	(1 а.е.м.)c/h = 7.513 006 6042(53) $\times 10^{14}$ $м^{-1}$	(1а.е.м.)c^2/h = 2.252 342 7168 (16) $\times 10^{23}$ Гц
1 E_h	(1 E_h) = 4.359 744 34(19) $\times 10^{-18}$ Дж	(1E_h)$/c^2$ = 4.850 869 79(21) $\times 10^{-35}$ кг	(1 E_h)/hc = 2.194 746 313 708(11) $\times 10^{7}$$м^{-1}$	(1 E_h)/h = 6.579 683 920 729 (33) $\times 10^{15}$ Гц

Продолжение таблицы 3.

	К	эВ	а.е.м.	E_h
1 Дж	(1 Дж)/k = 7.242 9716(66) $\times 10^{22}$ К	(1 Дж) = 6.241 509 34(14) $\times 10^{18}$ эВ	(1Дж)/c^2 = 6.700 535 85(30) $\times 10^{9}$ а.е.м.	(1 Дж) = 2.293 712 48 (10) $\times 10^{17} E_h$
1 кг	(1кг)c^2/k = 6.509 6582(59) $\times 10^{39}$ К	(1кг)c^2 = 5.609 588 85(12) $\times 10^{35}$ эВ	(1 кг) = 6.022 141 29(27) $\times 10^{26}$ а.е.м.	(1кг)c^2 = 2.061 485 968 (91) $\times 10^{34} E_h$
1 м$^{-1}$	(1м$^{-1}$)hc/k = 1.438 7770(13) $\times 10^{-2}$ К	(1м$^{-1}$)hc = 1.239 841 930(27) $\times 10^{-6}$ эВ	(1м$^{-1}$)h/c = 1.331 025 051 20(94) $\times 10^{-15}$ а.е.м.	(1м$^{-1}$)hc = 4.556 335 252 755 (23) $\times 10^{-8} E_h$
1 Гц	(1 Гц)h/k = 4.799 2434(44) $\times 10^{-11}$ К	(1 Гц)h = 4.135 667 516(91) $\times 10^{-15}$ эВ	(1 Гц)h/c2 = 4.439 821 6689(31) $\times 10^{-24}$ а.е.м.	(1 Гц)h = 1.519 829 846 0045 (76) $\times 10^{-16} E_h$
1 К	(1 К) = 1 К	(1 К)k = 8.617 3324(78) $\times 10^{-5}$ эВ	(1K)k/c^2 = 9.251 0868(84) $\times 10^{-14}$ а.е.м.	(1 К)k = 3.166 8114 (29) $\times 10^{-6} E_h$
1 эВ	(1 эВ)/k = 1.160 4519(11) $\times 10^{4}$ К	(1 эВ) = 1 эВ	(1эВ)/c^2 = 1.073 544 150(24) $\times 10^{-9}$ а.е.м.	(1 эВ) = 3.674 932 379 (81) $\times 10^{-2} E_h$
1 а.е.м.	(1а.е.м.)c^2/k = 1.080 954 08(98) $\times 10^{13}$ К	(1а.е.м.)c^2 = 931.494 061(21) $\times 10^{6}$ эВ	(1 а.е.м.) = 1 а.е.м.	(1а.е.м.)c^2 = 3.423 177 6845 (24) $\times 10^{7} E_h$
$1E_h$	$(1E_h)/k = 10^5$ $K\times$ 3.157 7504(29)	$(1E_h)$ = 27.211 385 05(60) эВ	$(1E_h)/c^2 = 10^{-8}$ а.е.м.$\times$ 2.921 262 3246(21)	$(1E_h)$ = $1E_h$

15.4. Таблица 4. Некоторые единицы в СИ и СГС

Величина	СИ	СГС	Отношение $\frac{\text{ед.СИ}}{\text{ед.СГС}}$
Длина	м	см	10^2
Время	с	с	1
Скорость	м/с	см/с	10^2
Ускорение	$м/с^2$	$см/с^2$	10^2
Частота колебаний	Гц	Гц	1
Угловая скорость	рад/с	рад/с	1
Масса	кг	г	10^3
Сила	Н	дин	10^5
Давление	Па	$дин/см^2$	10
Количество электричества	Кл	СГСЭ-ед.	$3 \cdot 10^9$
Потенциал	В	СГСЭ-ед.	1/300
Напряженность электрического поля	В/м	СГСЭ-ед.	$1/(3 \cdot 10^4)$
Сила тока	А	СГСЭ-ед.	$3 \cdot 10^9$
Магнитная индукция	Тл	Гс	10^4
Напряженность магнитного поля	А/м	Э	$4\pi/10^3$
Магнитный момент	$А \cdot м^2$	СГСЭ-ед.	10^3

15.5. Таблица 5. Работа выхода электрона из металла

Металл	А, эВ	Металл	А, эВ	Металл	А, 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	3.47

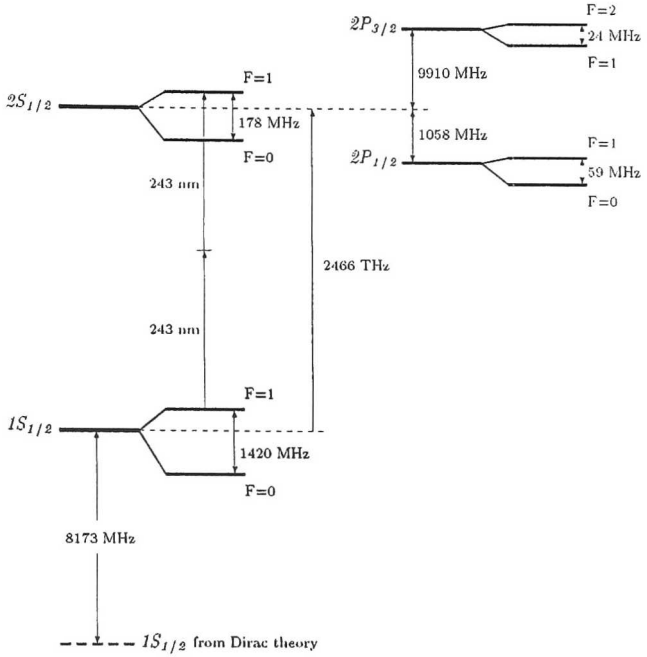

Рис. 43. Структура уровней энергии атома водорода.

15.7. Таблица 6. Константы двухатомных молекул

Молекула	Основной терм	Межядерное расстояние d, пм	Частота колебаний $\omega, 10^{14}$ рад/с	Ангармоничность x, 10^{-3}	Энергия диссоциации D, эВ
H_2	$^1\Sigma$	74.1	8.279	28.5	4.48
N_2	$^1\Sigma$	109.4	4.445	6.15	7.37
O_2	$^3\Sigma$	120.7	2.977	7.65	5.08
F_2	$^1\Pi$	128.2	2.147	8.51	1.6
P_2	$^1\Sigma$	189.4	1.470	3.59	5.03
S_2	$^3\Sigma$	188.9	1.367	3.93	4.4
Cl_2	$^1\Sigma$	198.8	1.064	7.09	2.48
Br_2	$^1\Sigma$	228.3	0.609	3.31	1.97
I_2	$^1\Sigma$	266.6	0.404	2.84	1.54
HF	$^1\Sigma$	91.7	7.796	21.8	5.8
HCl	$^1\Sigma$	127.5	5.632	17.4	4.43
HBr	$^1\Sigma$	141.3	4.991	17.1	3.75
HI	$^1\Sigma$	160.4	4.350	17.2	3.06
CO	$^1\Sigma$	112.8	4.088	6.22	9.7
NO	$^2\Pi$	115.0	3.590	7.55	5.29
OH	$^2\Pi$	97.1	7.036	22.2	4.35

15.8. Таблица 7. Физические параметры некоторых твердых тел

Вещество	Молярная масса кг/моль	Плотность 10^3 кг/м^3	Температура Дебая, К	Концентрация свободных (N/V), 10^{22} см$^{-3}$	Энергия Ферми, эВ
Алюминий	0.027	2.7	433	18.06	11.63
Бериллий	0.009	1.85	1481	24.20	14.14
Германий	0.073	5.46	373	—	—
Железо	0.056	7.8	472	—	—
Золото	0.197	19.3	162	5.90	5.51
Индий	0.115	7.28	112	11.49	8.60
Кадмий	0.112	8.65	210	9.28	7.46
Калий	0.039	0.86	91	1.40	2.12
Кальций	—	1.55	229	4.60	4.68
Кремний	0.028	2.38	645	—	—
Литий	0.007	0.53	344	4.70	4.72
Магний	0.024	1.74	403	8.60	7.13
Медь	0.064	8.9	347	8.45	7.00
Натрий	0.023	0.97	156	2.65	3.23
Никель	0.060	8.9	477	—	—
Олово	—	5.85	199	14.48	10.03
Платина	0.195	21.5	237	—	—
Свинец	0.207	11.3	105	13.20	9.37
Серебро	0.108	10.5	227	5.85	5.48
Цинк	0.065	7.0	329	13.10	9.39

Разложение Зоммерфельда применимо к интегралам вида:

$$\int_{-\infty}^{\infty} H(E)f(E)dE, \quad f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{kT}}+1}, \tag{451}$$

где $H(E)$ обращается в нуль при $E \to \infty$ и растет как степенная функция энергии E. Введем обозначение:

$$K(E) = \int_{-\infty}^{E} H(E')dE', \quad H(E) = \frac{dK(E)}{dE} \tag{452}$$

Выполним интегрирование по частям в исходном интеграле:

$$\int_{-\infty}^{\infty} H(E)f(E)dE = \int_{-\infty}^{\infty} K(E)\left(\frac{-dK(E)}{dE}\right) \tag{453}$$

Разложим K(E) в ряд Тейлора вблизи точки $E = \mu$:

$$K(E) = K(\mu) + \sum_{n=1}^{\infty}\left[\frac{(E-\mu)^n}{n!}\right]\left[\frac{d^nK(E)}{dE^n}\right]_{E=\mu}. \tag{454}$$

Первое слагаемое дает $K(\mu)$. Поскольку производная $\partial f/\partial E$ четная функция $(E-\mu)$, вклад в интеграл дают только четные степени n. Тогда находим:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dEH(E)f(E) = \int_{-\infty}^{\mu} H(E)dE + \sum_{n=1}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{(E-\mu)^{2n}}{(2n)!}\times \tag{455}$$

$$\times\left(-\frac{\partial f}{\partial E}\right)dE\frac{d^{2n-1}}{dE^{2n-1}}H(E)|_{E=\mu}.$$

Делая далее подстановку $x = (E-\mu)/kT$, получим:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dEH(E)f(E) = \int_{-\infty}^{\mu} H(E)dE + \sum_{n=1}^{\infty} a_n(kT)^{2n}\frac{d^{2n-1}}{dE^{2n-1}}H(E)|_{E=\mu}, \tag{456}$$

где безразмерные численные постоянные a_n определяются выражением:

$$a_n = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{x^{2n}}{(2n)!}\left(-\frac{d}{dx}\frac{1}{e^x+1}\right)dx = 2\left(1-\frac{1}{2^{2n}}+\frac{1}{3^{2n}}-\frac{1}{4^{2n}}+\frac{1}{5^{2n}}-\ldots\right). \tag{457}$$

Коэффициенты a_n можно записать с помощью известной дзета-функции Римана $\zeta(n)$:

$$a_n = \left(2 - \frac{1}{2^{2(n-1)}}\right)\zeta(2n), \quad \zeta(n) = 1 + \frac{1}{2^n} + \frac{1}{3^n} + \frac{1}{4^n} + \ldots. \tag{458}$$

Для первых нескольких n функция $\zeta(2n)$ имеет следующие значения:

$$\zeta(2n) = 2^{2n-1}\frac{\pi^{2n}}{(2n)!}B_n, \; B_1 = \frac{1}{6}, \; B_2 = \frac{1}{30}, \; B_3 = \frac{1}{42}, \; B_4 = \frac{1}{30}, \ldots \tag{459}$$

B_n числа Бернулли.

15.10. Примерный перечень вопросов

1. Равновесное тепловое излучение. Опыты Люммера и Прингсгейма. Поглощающая способность тела. Излучательная способность тела. Объемная спектральная плотность излучения.

2. Интенсивность, удельная интенсивность излучения. Связь между интенсивностью излучения и объемной плотностью излучения. Закон Кирхгофа.

3. Связь давления излучения и объемной плотности излучения. Второй закон термодинамики для равновесного теплового излучения. Закон Стефана-Больцмана.

4. Термическое уравнение состояния, калорическое уравнение состояния, энтропия равновесного теплового излучения.

5. Излучение в полости с зеркальными стенками. Число стоячих электромагнитных волн в полости.

6. Адиабатические инварианты равновесного теплового излучения: $V \cdot T^3 = \text{const}$, $\omega^3 V = \text{const}$, $\omega/T = \text{const}$, $u/\omega^4 = \text{const}$.

7. Критерий Вина. Закон смещения Вина.

8. Теорема о равнораспределении энергии по степеням свободы. Закон Рэлея-Джинса. Ультрафиолетовая катастрофа.

9. Среднее значение энергии осциллятора. Гипотеза Планка. Закон излучения Планка.

10. Спонтанные и вынужденные переходы. Вывод А. Эйнштейна формулы Планка.

11. Основы квантовой теории света. Энергия и импульс световых квантов.

12. Эффект Доплера. Фотоэффект. Уравнение Эйнштейна. Схема экспериментальной установки фотоэффекта. Коротковолновая граница сплошного рентгеновского спектра.

13. Эффект Комптона. Схема экспериментальной установки.

14. Структура атома. Опыт Резерфорда. Дифференциальное эффективное сечение рассеяния α-частиц.

15. Экспериментальное изучение спектра энергии атома водорода. Серии Бальмера, Лаймана, Пашена, Брэкета, Пфунда. Формула Бальмера для волнового числа. Постоянная Ридберга.

16. Комбинационный принцип Ритца. Понятие спектрального терма.

17. Постулаты Бора. Квантовая теория Бора-Зоммерфельда. Квантовый постулат Бора-Зоммерфельда. Круговые орбиты. Эллиптические орбиты. Формула Бора для уровней энергии атома водорода.

18. Релятивистская теория Бора-Зоммерфельда атома водорода. Формула тонкой структуры спектра энергии.

19. Экспериментальное подтверждение теории Бора в опытах Франка-Герца.

20. Гипотеза де Бройля. Волны де Бройля. Волновой пакет. Фазовая и групповая скорость. Зависимость ширины волнового пакета от времени.

21. Экспериментальное подтверждение гипотезы де Бройля в опытах Девиссона, Кунсмана, Джермера. Дифракция электронов на кристаллах. Условие Вульфа-Брэгга.

22. Дифракция электронов на двух щелях.

23. Матричная механика Гейзенберга. Схема элементов Гейзенберга. Правило дифференцирования элемента Гейзенберга. Уравнение движения Гейзенберга. Перестановочное соотношение Гейзенберга.

24. Линейный гармонический осциллятор в матричной механике Гейзенберга.

25. Волновое уравнение Шредингера. Операторы импульса и координаты в теории Шредингера.

26. Копенгагенская интерпретация волновой функции.

27. Парадокс Эйнштейна, Подольского, Розена.

28. Уравнение непрерывности, плотность вероятности, плотность потока вероятности.

29. Принцип суперпозиции в квантовой механике.

30. Операторы в квантовой механике. Самосопряженные операторы. Спектр самосопряженного оператора. Среднее значение оператора. Собственные функции самосопряженных операторов. Коммутирующие самосопряженные операторы.

31. Среднее квадратичное отклонение оператора. Соотношение неопределенностей Гейзенберга.

32. Изменение среднего значения оператора со временем. Квантовая скобка Пуассона. Скорость изменения оператора. Теорема Эренфеста.

33. Условия, при которых движение пакета приближенно совпадает с движением материальной точки.

34. Общие свойства одномерного движения. Осцилляционная теорема.

35. Движение материальной точке в потенциальной яме конечной глубины, бесконечной глубины.

36. Нормировка волновой функции в случае дискретного и непрерывного спектра.

37. Прохождение частицы под потенциальным барьером. Коэффициент прохождения.

38. Уравнение Шредингера для линейного гармонического осциллятора. Условие нормировки волновой функции.

39. Движение частицы в центральном поле в квантовой механике. Сферические волновые функции. Условие нормировки сферических волновых функций.

40. Момент импульса в квантовой механике. Физический смысл квантовых чисел m и l.

41. Собственные функции и собственные значения операторов $\mathbf{L}^2$, $\mathbf{L}_z$.

42. Теория водородоподобного атома. Радиальное волновое уравнение. Спектр энергии. Кратность вырождения уровня энергии.

43. Причина вырождения уровня энергии по магнитному и орбитальному квантовым числам. Оператор вектора эксцентриситета.

44. Энергетические уровни и спектральные серии щелочных металлов.

45. Спин электрона. Опыты Эйнштейна-де Гааза, Штерна Герлаха. Гипотеза Уленбека и Гаудсмита.

46. Оператор спина электрона в квантовой механике.

47. Атом в магнитном поле. Уравнение Паули. Простой эффект Зеемана.

48. Полный момент импульса электрона. Коммутационные соотношения. Собственные функции и собственные значения операторов J^2, J_z. Теорема сложения моментов.

49. Стационарная теория возмущений в квантовой механике. Поправка первого порядка к уровням энергии и волновым функциям.

50. Аномальный эффект Зеемана. Фактор Ланде. Эффект Пашена-Бака.

51. Тонкая структура спектра энергии атома водорода. Релятивистская и спин-орбитальная поправки.

52. Квантовая теорема вириала. Теорема Фейнмана-Хеллманна.

53. Сверхтонкая структура основного состояния атома водорода.

54. Атомы со многими электронами. Принцип тождественности одинаковых частиц. Симметричная и антисимметричная волновые функции.

55. Фермионы и бозоны. Принцип Паули.

56. Теория периодической системы Д.И. Менделеева. Электронные слои и оболочки. Электронные состояния легких атомов. Правила Хунда.

57. Атом водорода в электрическом поле. Квантование в параболических координатах. Эффект Штарка.

58. Нестационарная теория возмущений. Вычисление вероятностей перехода.

59. Правила отбора для дипольного излучения электрона, движущегося в центральном поле.

60. Лэмбовский сдвиг уровней энергии.