

КВАНТОВАЯ ФИЗИКА

ЛЕКЦИЯ 1

При рассмотрении проблемы электромагнитного излучения твердых тел классическая физика столкнулась с непреодолимыми трудностями. Данные теоретических расчетов существенно не совпадали с экспериментальными данными в области коротковолнового диапазона излучения.

В 1900 г. Максом Планком была выдвинута принципиально новая физическая гипотеза о дискретности энергии теплового излучения и наличии ее минимальной порции – кванта энергии излучения. Эта гипотеза позволила Планку описать равновесное тепловое излучение во всех диапазонах длин волн.

Развивая гипотезу о квантах, Альберт Эйнштейн выдвинул корпускулярную теорию излучения, в которой электромагнитное излучение представлялось как поток частиц, названных фотонами. Фотонная теория излучения смогла объяснить явления квантовой оптики.

В дальнейшем идея корпускулярно-волнового дуализма была обобщена на все материальные объекты в природе, что привело к созданию **квантовой физики**.

Законы теплового излучения

Тепловым излучением называется электромагнитное излучение, испускаемое нагретыми телами за счёт своей внутренней энергии в широком диапазоне частот.

Если несколько нагретых излучающих тел окружить идеально отражающей оболочкой, то внутри оболочки установится термодинамическое равновесие, т.е. температуры всех тел станут равными, а распределение энергии между телами и излучением не будет изменяться со временем. Такое излучение, находящееся в равновесии с излучающими телами называют **равновесным**. **Равновесность является основным свойством теплового излучения. Другие виды излучения этим свойством не обладают.**

Для равновесного излучения, которому можно приписать температуру излучающих тел, можно рассчитать и термодинамические характеристики, например, внутреннюю энергию, давление, энтропию и т.д.

Равновесное тепловое излучение однородно, т.е. его плотность энергии одинакова во всех точках внутри полости, где оно заключено. Такое излучение изотропно и неполяризовано - оно содержит все возможные направления распространения и направления колебаний векторов \vec{E} и \vec{H} .

Энергию, излучаемую с единицы поверхности нагретого тела в единицу времени и приходящуюся на единичный диапазон частот, называют **спектральной испускательной способностью** тела или **спектральной плотностью энергетической светимости**.

$$r_{\omega,T} \equiv r(\omega, T), \quad [r_{\omega,T}] = \text{Дж/м}^2$$

ω – частота излучения;

T – температура тела.

Суммарная мощность, излучаемая с единицы поверхности тела по всему диапазону частот

$$R_T = \frac{P}{S} = \int_0^{\infty} r_{\omega,T} d\omega, \quad [R_T] = \text{Вт/м}^2$$

Называется **энергетической светимостью**.

Спектральную испускательную способность можно представить и как функцию длины волны излучения λ .

$$r_{\lambda,T} d\lambda = r_{\omega,T} d\omega.$$

Учитывая, что $\omega = \frac{2\pi c}{\lambda}$ получаем $r_{\lambda,T} = r_{\omega,T} \frac{d\omega}{d\lambda} = -r_{\omega,T} \frac{2\pi c}{\lambda^2}$.

Знак $\ll - \gg$ носит формальный характер т.к. указывает лишь на то, что с возрастанием длины волны λ частота убывает, и его можно опустить.

Спектральной поглотительной способностью тела называют безразмерную величину

$$a_{\omega,T} = \frac{d\Phi'_{\omega}}{d\Phi_{\omega}}, \quad \text{где}$$

$d\Phi_{\omega}$ – поток падающего на поверхность тела излучения в узком диапазоне частот $d\omega$, вблизи частоты ω ;

$d\Phi'_{\omega}$ – поток излучения, поглощаемый телом.

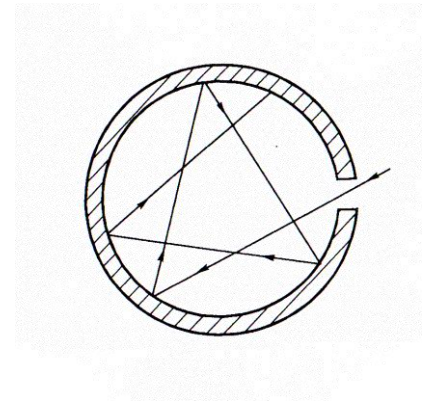
$$a_{\omega,T} \equiv a(\omega, T)$$

Тело, у которого $a_{\omega,T} < 1$ и одинакова по всему диапазону частот называют **серым телом**.

Абсолютно черным телом (АЧТ) называют тело, у которого $a_{\omega,T} = 1$ на всех частотах и при любых температурах. В теории теплового излучения оно является эталонным телом.

Моделью АЧТ является замкнутая полость с малым отверстием, диаметр которого значительно меньше поперечных размеров полости, которая может иметь любую форму и может быть изготовлена из любого непрозрачного материала.

Именно малому отверстию в полости и приписывается свойство АЧТ. Если стенки полости поддерживать при некоторой температуре T , то отверстие будет излучать как абсолютно черное тело с температурой T .



Закон Кирхгофа

Отношение испускательной и поглощательной способностей одинаково для всех тел в природе, включая абсолютно черное тело, и является одной и той же универсальной функцией частоты (длины волны) и температуры тела.

$$\left(\frac{r_{\omega,T}}{a_{\omega,T}} \right)_1 = \left(\frac{r_{\omega,T}}{a_{\omega,T}} \right)_2 = \dots = \frac{r_{\omega,T}^*}{1} = f(\omega, T) \quad \text{или}$$

$$\left(\frac{r_{\lambda,T}}{a_{\lambda,T}} \right)_1 = \left(\frac{r_{\lambda,T}}{a_{\lambda,T}} \right)_2 = \dots = \frac{r_{\lambda,T}^*}{1} = \varphi(\lambda, T), \quad \text{где}$$

$r_{\omega,T}^*$ и $r_{\lambda,T}^*$ - испускательные способности АЧТ

$$r_{\lambda,T}^* = r_{\omega,T}^* \cdot \frac{2\pi c}{\lambda^2}$$

Зная $r_{\omega,T}^*$ и $a_{\omega,T}$ реального тела можно определить энергию, излучаемую этим телом в любом диапазоне частот.

Закон Стефана-Больцмана

Энергетическая светимость абсолютно черного тела пропорциональна четвертой степени его абсолютной (термодинамической) температуры.

$$R_T^* = \sigma T^4, \quad \text{где}$$

$\sigma = 5,671 \cdot 10^{-8} \text{ Вт/м}^2\text{К}^4$ - постоянная Стефана-Больцмана.

Для реальных тел $R_T = A_T R^* = A_T \cdot \sigma T^4$, где A_T - интегральная поглощательная способность тела, которая зависит от температуры и всегда меньше единицы ($A_T < 1$).

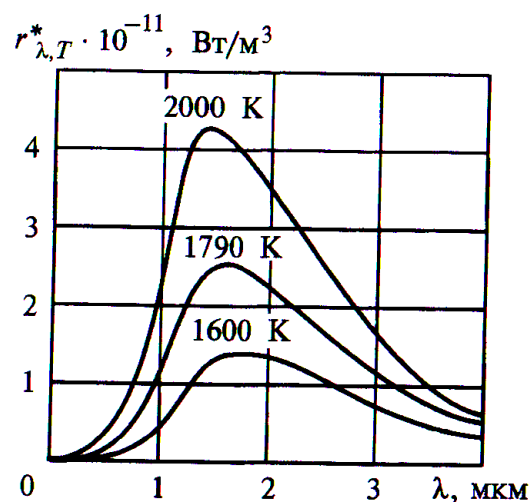
Закон смещения Вина

Длина волны, на которую приходится максимум испускательной способности АЧТ, обратно пропорциональна его абсолютной температуре.

$$\lambda_m = \epsilon/T, \quad \text{где}$$

$\epsilon = 2,898 \cdot 10^{-3} \text{ м} \cdot \text{К}$ - постоянная Вина

Для реальных тел закон Вина выполняется лишь качественно, т.е. с ростом температуры любого тела длина волны, вблизи которой тело излучает больше всего энергии, смещается в сторону коротких длин волн, но зависимость не такая простая.



Задача

Максимум энергии в спектре Солнца приходится на диапазон длин волн вблизи 470 нм. Считая Солнце абсолютно черным телом, рассчитайте, на сколько уменьшается ежегодно масса Солнца за счет излучения. Через сколько лет масса Солнца уменьшится на 1%? В настоящее время масса Солнца $M_c = 2 \cdot 10^{30}$ кг. Его эквивалентный диаметр $D_0 = 1,4 \cdot 10^9$ м.

Решение:

Используя закон Вина, найдем температуру Солнца

$$T = \frac{c}{\lambda_M} = \frac{2,898 \cdot 10^{-3}}{470 \cdot 10^{-9}} = 6,16 \cdot 10^3 \text{ K}$$

По закону Стефана-Больцмана находим энергию, излучаемую с 1 м^2 за 1 секунду

$$R = \sigma T^4 = 5,671 \cdot 10^{-8} \cdot (6,16 \cdot 10^3)^4 = 8,17 \cdot 10^7 \text{ Вт/м}^2.$$

Энергия, излучаемая всей поверхностью Солнца за год

$$E = R S t = R \pi D_o^2 \cdot t = 8,17 \cdot 10^7 \cdot \pi (1,4 \cdot 10^9)^2 \cdot 31,6 \cdot 10^6 = 5 \cdot 10^{33} \text{ Дж.}$$

Соответствующая потеря массы за 1 год

$$\Delta m = \frac{E}{c^2} = \frac{5 \cdot 10^{33}}{9 \cdot 10^{16}} = 5,6 \cdot 10^{16} \text{ кг}$$

Для уменьшения массы Солнца на 1% потребуется время

$$\Delta t = \frac{0,01 M_c}{\Delta m} = \frac{0,01 \cdot 2 \cdot 10^{30}}{5,6 \cdot 10^{16}} \approx 4 \cdot 10^{11} \text{ лет.}$$

Объемная плотность энергии теплового излучения

Если внутри замкнутой полости произвольной формы с идеально отражающими стенками поместить небольшое АЧТ с температурой T , то полость равномерно заполнится равновесным тепловым излучением с **объемной плотностью энергии $u_T \equiv u(T)$** , зависящей от температуры.

$$u_T = \int_0^\infty u_{\omega,T} d\omega, \quad [u_T] = \text{Дж/м}^3, \quad \text{где}$$

$u_{\omega,T} \equiv u(\omega, T)$ - объемная плотность энергии излучения, приходящейся на интервал частот от ω до $(\omega + d\omega)$ - **спектральная плотность энергии** при данной T . $[u_{\omega,T}] = \text{Дж·с/м}^3$.

Между испускательной способностью АЧТ $r_{\omega,T}^*$ и функцией $u_{\omega,T}$ можно вывести соотношение

$$r_{\omega,T}^* = \frac{c}{4} u_{\omega,T} \quad \Rightarrow \quad R_T^* = \frac{c}{4} u_T, \quad \text{где}$$

c - скорость электромагнитных волн в вакууме.

Для теоретического обоснования полученных в экспериментах зависимостей $r_{\lambda,T}$, а, следовательно, и $r_{\omega,T}$ необходимо было создать теорию, позволяющую найти $u_{\omega,T}$.

Формулы Рэлея-Джинса и Вина

Применяя к тепловому излучению классический закон равнораспределения энергии по степеням свободы (на каждую стоячую электромагнитную волну частотой ω приходится в среднем энергия kT) Рэлей и Джинс получили

$$u_{\omega,T} = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} kT \Rightarrow r_{\omega,T}^* = \frac{\omega^2}{4\pi^2 c^2} kT$$

Попытка получить закон Стефана – Больцмана из этой формулы приводит к абсурдному результату, получившему название – «ультрафиолетовая катастрофа»:

$$R_T = \int_0^{\infty} r_{\omega,T} d\omega = \frac{kT}{4\pi^2 c^2} \int_0^{\infty} \omega^2 d\omega = \infty$$

Формула Рэлея – Джинса согласуется с экспериментом только в области малых частот (больших значений λ).

В области больших частот ω (малых значений λ) эксперимент хорошо согласовывается с эмпирической формулой Вина

$$r_{\omega,T} = C_1 \cdot \omega^3 \cdot \exp\left(-C_2 \frac{\omega}{T}\right), \quad \text{где } C_1 \text{ и } C_2 - \text{ константы}$$



Гипотеза о квантах. Формула Планка

Планк получил формулу для $u_{\omega,T}$, хорошо согласующуюся с экспериментальными данными во всем диапазоне частот. Для этого он ввел гипотезу, коренным образом противоречащую представлениям классической физики о непрерывном испускании и поглощении электромагнитного излучения веществом.

Планк предположил, что энергия испускаемого телом электромагнитного излучения может принимать не любые, а только вполне определенные дискретные значения

$$E_n = n\varepsilon_0,$$

Пропорциональные некоторой элементарной энергии (кванту энергии)

$$\varepsilon_0 = h\nu = \hbar \omega, \text{ где}$$

$$h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ Дж}\cdot\text{с} \quad \text{и} \quad \hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,05 \cdot 10^{-34} \text{ Дж}\cdot\text{с} = 0,658 \cdot 10^{-15} \text{ эВ}\cdot\text{с} -$$

постоянные Планка.

Размерность физической величины «энергия×время» в механике называют **действием**, поэтому постоянную Планка называют также **квантом действия**. Постоянная Планка имеет также размерность момента импульса (Дж·с = Н·с·м)

Используя понятие кванта энергии Планк получил известную **формулу Планка**

$$u_{\omega,T} = \frac{\hbar \omega^3}{\pi^2 c^3} \cdot \frac{1}{e^{\frac{\hbar \omega}{kT}} - 1} \quad \Rightarrow \quad r_{\omega,T}^* = \frac{c}{4} u_{\omega,T} = \frac{\hbar \omega^3}{4\pi^2 c^2} \cdot \frac{1}{e^{\frac{\hbar \omega}{kT}} - 1}.$$

Задача

Используя формулу Планка для $r_{\omega,T}^*$ доказать законы Стефана-Больцмана и Вина.

Решение:

$$1) \quad R^* = \int_0^\infty r_{\omega,T}^* d\omega = \frac{\hbar}{4\pi^2 c^2} \int_0^\infty \frac{\omega^3}{e^{\frac{\hbar \omega}{kT}} - 1} d\omega$$

Из таблиц определенных интегралов («Приложения» к сборнику задач Иродова)

$$\int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = \frac{\pi^4}{15}, \text{ т.е. } R^* = \frac{\pi^2 k^4}{60 c^2 \hbar^3} \cdot T^4 \Rightarrow R^* = \sigma T^4, \text{ где } \sigma = \frac{\pi^2 k^4}{60 c^2 \hbar^3}.$$

2) Закон смещения Вина получается при анализе формулы Планка на экстремум.

$$0 = \frac{d}{d\omega} \left(\frac{\hbar \omega^3}{4\pi^2 c^2 \left(e^{\frac{\hbar \omega}{kT}} - 1 \right)} \right) = \frac{\hbar}{4\pi^2 c^2} \cdot \frac{3\omega_m^2 \left(e^{\frac{\hbar \omega_m}{kT}} - 1 \right) - \omega_m^3 \frac{\hbar}{kT} e^{\frac{\hbar \omega_m}{kT}}}{\left(e^{\frac{\hbar \omega_m}{kT}} - 1 \right)^2}, \text{ т.е.}$$

$$3 \left(e^{\frac{\hbar \omega_m}{kT}} - 1 \right) = \omega_m \frac{\hbar}{kT} \cdot e^{\frac{\hbar \omega_m}{kT}}$$

При $\alpha \approx 1$ можно записать $e^\alpha \approx 1 + \alpha$.

$$\text{Тогда } 3 \left(1 + \frac{\hbar \omega_m}{kT} - 1 \right) = \frac{\hbar \omega_m}{kT} \left(1 + \frac{\hbar \omega_m}{kT} \right) \Rightarrow 2 = \frac{\hbar \omega_m}{kT}$$

Учитывая, что $\omega_m = \frac{2\pi c}{\lambda_m}$, получаем окончательно $\lambda_m = \frac{\hbar \pi c}{kT} = \frac{v}{T}$, где

$$v = \frac{\hbar \pi c}{k}.$$

Лекция 2

Фотоэффект

Дальнейшее развитие квантовая гипотеза Планка получила прежде всего в работах Эйнштейна, который выдвинул гипотезу о световых квантах – фотонах.

Фотон – это ультрарелятивистская незаряженная частица, имеющая нулевую массу покоя и всегда движущуюся со скоростью c . Если при неупругом столкновении с другой элементарной частицей фотон «останавливается», то он исчезает, передавая всю свою энергию этой частице. Энергия фотона определяется выражением

$$\varepsilon_\phi = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = \hbar\omega = \frac{2\pi \cdot \hbar c}{\lambda}.$$

Формально фотону можно приписать релятивистскую массу

$$m_{\phi} = \varepsilon_{\phi}/c^2 = h\nu/c^2 = h/c\lambda = \frac{\hbar\omega}{c^2} = \frac{2\pi \cdot \hbar}{c\lambda}.$$

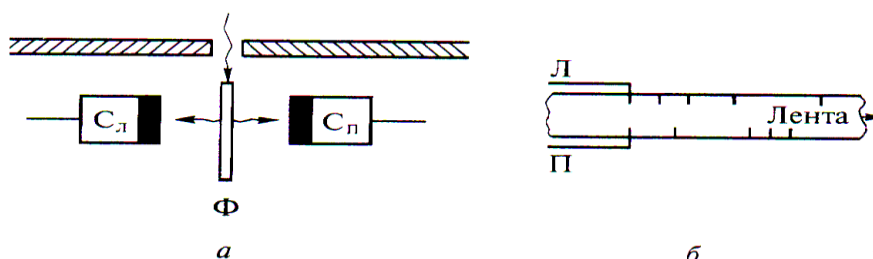
Импульс фотона

$$p_{\phi} = \varepsilon_{\phi}/c = h/\lambda = h\nu/c = \frac{2\pi \cdot \hbar}{\lambda} = \frac{\hbar\omega}{c}.$$

Если направление распространения световой волны задать волновым вектором \vec{k} , где ($k = \frac{2\pi}{\lambda}$), то

$$\vec{p}_{\phi} = \hbar\vec{k}.$$

Впервые отдельные фотоны излучения были обнаружены в **опытах**, проведенных **Боте** при облучении тонкой металлической фольги слабым пучком рентгеновского излучения, под действием которого она сама становилась источником рентгеновского излучения.

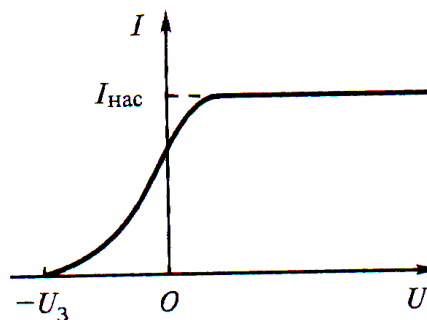
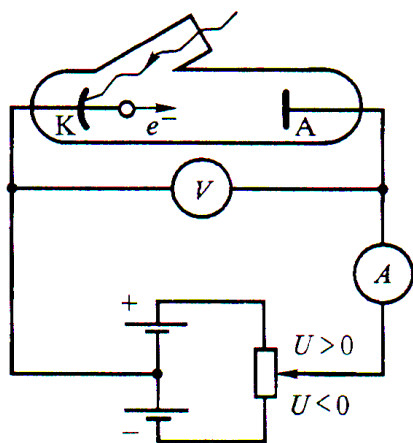


Если бы энергия этого излучения распространялась в виде сферических волн, то левый и правый счетчики $C_{\text{л}}$ и $C_{\text{п}}$ должны срабатывать практически одновременно, а самописцы Л и П , связанные со счетчиками, должны оставлять метки на движущейся ленте друг против друга. Опыт, однако показал, что счетчики реагировали совершенно независимо друг от друга. Все происходило так, как если бы излучение фольги Φ распространялось в виде отдельных квантов, которые могли попадать либо в левый, либо в правый счетчик.

Гипотеза о корпускулярных свойствах света позволила объяснить результаты экспериментов по фотоэлектрическому эффекту, совершенно непонятных с позиций классической электромагнитной теории.

Внешним фотоэффектом называется явление испускания электронов вещества под действием электромагнитного излучения.

Исследование закономерностей фотоэффекта проводят на установке с фотоэлементом в виде вакуумной двухэлектродной лампы, схематически показанной на рисунке.



Металлический катод **К** при освещении его через кварцевое окошко видимым светом или ультрафиолетовым излучением испускает электроны. Эти фотоэлектроны, достигая аннокатода **А**, обеспечивают протекание в цепи электрического тока, который фиксируется миллиамперметром. Источники питания подключены так, что позволяют изменять полярность подаваемого на фотоэлемент напряжения.

Здесь же приведен качественный вид вольт-амперной характеристики такого фотоэлемента для случая неизменного светового потока, падающего на катод. Ускоряющему электрическому полю соответствует положительное напряжение, в области которого все испускаемые катодом электроны достигают анода, обуславливая фототок насыщения $I_{\text{нас}}$.

При отрицательном напряжении ($U < 0$) фотоэлектрон попадает в тормозящее электрическое поле, преодолеть которое он может, лишь имея определенный запас кинетической энергии. При некотором отрицательном напряжении, модуль которого U_3 называют задерживающим напряжением (потенциалом), фототок становится равным нулю.

Измерив U_3 , можно определить максимальную кинетическую энергию K_m или максимальную скорость v_m фотоэлектронов.

$$K_m = \frac{m_e v_m^2}{2} = e \cdot U_3$$

Законы фотоэффекта

- 1) Для монохроматического света определенной длины волны фототок насыщения пропорционален световому потоку, падающему на катод.
- 2) Максимальная кинетическая энергия фотоэлектронов не зависит от величины светового потока, а определяется лишь частотой излучения.
- 3) Для каждого вещества катода существует своя граничная частота ν_K ,

такая, что излучение с частотой $\nu < \nu_k$, фотоэффекта не вызывает (красная граница).

Уравнение Эйнштейна для внешнего фотоэффекта

В процессе соударения фотона со свободным электроном металла фотон передаёт электрону энергию

$$\varepsilon_{\phi} = A_{\text{в}} + K_{\text{м}}, \text{ где}$$

$A_{\text{в}}$ – **работа выхода** электрона из металла (минимальная энергия, необходимая для преодоления потенциального барьера при освобождении электрона из данного металла катода).

Из этого уравнения непосредственно вытекают второй и третий законы фотоэффекта. Если $\varepsilon_{\phi} < A_{\text{в}}$ получаем простые формулы для частоты и длины волны красной границы

$$\nu_k = A_{\text{в}}/h; \quad \omega_k = \frac{A_{\text{в}}}{\hbar} \quad \text{и} \quad \lambda_k = hc/A_{\text{в}} = 2\pi \hbar c/A_{\text{в}}$$

Первый закон фотоэффекта (закон Столетова) также объясняется корпускулярной природой света – число вырванных из металла электронов и, следовательно, фототок насыщения пропорциональны числу падающих на металл фотонов, которое определяется величиной потока энергии излучения.

Важной количественной характеристикой фотоэффекта является квантовый выход Y , определяющий число вылетевших электронов, приходящихся на один, падающий на металл фотон.

$Y \approx 10^{-4}$ электрон/фотон для $\nu \approx \nu_k$

$Y = 0,01 \dots 0,05$ электрон/фотон для $\varepsilon_{\phi} \approx 1$ эВ.

$Y \approx 0,1$ электрон/фотон для $\varepsilon_{\phi} \approx 10^3$ эВ (рентгеновское излучение).

Эффект Комптона

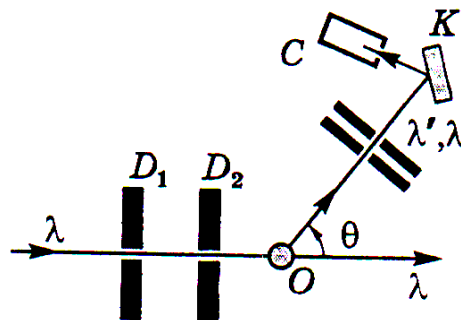
При большой энергии фотонов ($> 0,01$ МэВ) процесс поглощения фотонов электронами вещества становится маловероятным. В этом случае при взаимодействии электромагнитного излучения с веществом наблюдается его рассеяние с изменением направления распространения.

Эффектом Комптона называется явление увеличения длины волны излучения вследствие рассеяния его веществом. Изменение длины волны не зависит от материала рассеивающего образца и исходной длины волны λ , а определяется только величиной угла рассеяния θ .

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \lambda_K(1 - \cos\theta), \text{ где}$$

λ' – комptonовское смещение (длина волны рассеянного излучения)

$\lambda_K = 2,426 \cdot 10^{-12} \text{ м}$ – комptonовская длина волны электрона, полученная Комптоном экспериментально.



Диафрагмы D_1 и D_2 выделяли узкий пучок монохроматического рентгеновского излучения, который падал затем на исследуемый образец O . Для исследования спектрального состава рассеянного излучения оно после прохода ряда диафрагм попадало на кристалл K рентгеновского спектрографа, а затем в счётчик C или на фотопластинку.

Классическая теория оказалась не в состоянии объяснить закономерности комptonовского рассеяния и в первую очередь появление смещенной компоненты. С точки зрения классической теории электромагнитного излучения электрон сам как антенна под действием падающей волны начинает излучать вторичные сферические волны на частоте падающего излучения.

Фотонная теория излучения объясняет этот эффект как следствие упругого рассеяния фотона $\Phi \rightarrow \Phi'$ на свободном электроне вещества. Формула Комптона оказывается следствием законов сохранения энергии и импульса при упругом соударении фотона и электрона.

Пусть на покоящийся электрон с энергией $m_e c^2$ падает фотон с энергией ϵ_Φ и импульсом $p_\Phi = \epsilon_\Phi / c$. После столкновения энергия и импульс фотона станут ϵ'_Φ и $p'_\Phi = \epsilon'_\Phi / c$, а энергия и импульс электрона отдачи E и p .

Поскольку в результате столкновения электрон может стать релятивистским, этот процесс будем рассматривать на основе релятивистской

механики из которой для электрона можно записать условие инвариантности энергии и импульса

$$E^2 - p^2 c^2 = m_e^2 c^4$$

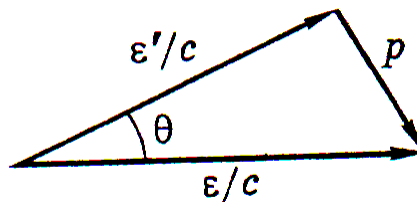
В соответствии с законами сохранения энергии и импульса системы фотон-электрон до и после столкновения можно записать следующие равенства:

$$\text{ЗСЭ: } \varepsilon_{\phi} + m_e c^2 = \varepsilon'_{\phi} + E \Rightarrow E^2 = (\varepsilon_{\phi} - \varepsilon'_{\phi} + m_e c^2)^2$$

$$\text{ЗСИ: } p^2 = (\varepsilon_{\phi}/c)^2 + (\varepsilon'_{\phi}/c)^2 - 2(\varepsilon_{\phi}\varepsilon'_{\phi}/c^2) \cos\theta \quad \text{или}$$

$$p^2 c^2 = \varepsilon_{\phi}^2 + \varepsilon'_{\phi}^2 - 2\varepsilon_{\phi}\varepsilon'_{\phi} \cos\theta$$

Равенство для ЗСИ записано на основе теоремы косинусов для треугольника импульсов.



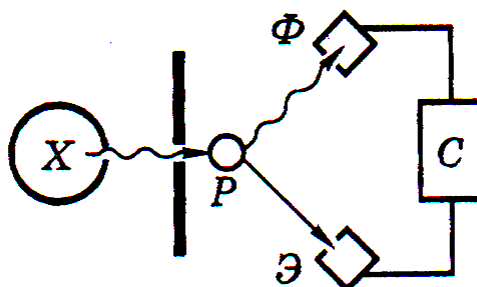
Подставляя значения E^2 и $p^2 c^2$ в условие инвариантности получаем

$$\varepsilon_{\phi} - \varepsilon'_{\phi} = \frac{\varepsilon_{\phi}\varepsilon'_{\phi}}{m_e c^2} (1 - \cos\theta)$$

С учётом того, что $\varepsilon_{\phi} = \hbar\omega = \frac{2\pi\hbar c}{\lambda}$ и $\varepsilon'_{\phi} = \hbar\omega' = \frac{2\pi\hbar c}{\lambda'}$ имеем

окончательно $\lambda' - \lambda = A_k(1 - \cos\theta)$, где $A_k = \frac{2\pi\hbar}{m_e c} = 2,42 \cdot 10^{-12} \text{ м}$

С помощью счетчиков рассеянных фотонов Φ и электронов Ξ установленных симметрично относительно, рассеивателя P и включённых в схему совпадений C было доказано экспериментально существование индивидуального столкновения фотона с электроном.



Задача

При облучении вещества рентгеновским излучением с некоторой длиной волны λ обнаружили, что максимальная кинетическая энергия релятивистских электронов отдачи равна K_m . Определить λ .

Решение:

$K = K_m$ если $p = p_{\text{макс}}$, что возможно только если векторы \vec{p}_ϕ , \vec{p}_ϕ' и \vec{p} коллинеарны, т.е. $\theta = 0$

Учитывая, что $E = mc^2 + K$, получаем для законов сохранения энергии и импульса:

$$\text{ЗСЭ: } \varepsilon_\phi - \varepsilon'_\phi = K_m$$

$$\Rightarrow 2\varepsilon_\phi = K_m + pc, \quad \text{где} \quad \varepsilon_\phi = \frac{2\pi\hbar c}{\lambda}$$

$$\text{ЗСИ: } \varepsilon_\phi/c + \varepsilon'_\phi/c = p$$

Так как $pc = (K_m(K_m + 2m_e c^2))^{1/2}$ (смотри ниже Приложение) то

$$2 \frac{2\pi\hbar c}{\lambda} = K_m + \sqrt{K_m(K_m + 2m_e c^2)} \quad \Rightarrow \quad \lambda = \frac{4\pi\hbar c}{K_m(1 + \sqrt{1 + \frac{2m_e c^2}{K_m}})}$$

Приложение:

$$K = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} - mc^2 \Rightarrow \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} = \frac{mc^2}{K + mc^2} \Rightarrow 1 - \frac{v^2}{c^2} = \frac{m^2 c^4}{(K + mc^2)^2}$$

$$v = c \sqrt{1 - \frac{m^2 c^4}{(K + mc^2)^2}} = \frac{c}{K + mc^2} \sqrt{K^2 + 2Kmc^2 + m^2 c^4 - m^2 c^4} = \frac{c \sqrt{K(K + 2mc^2)}}{K + mc^2}$$

$$p = \frac{mv}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} = \frac{mc \sqrt{K(K + 2mc^2)}}{K + mc^2} \cdot \frac{(K + mc^2)}{mc^2} = \frac{1}{c} \sqrt{K(K + 2mc^2)} \quad \text{и окончательно}$$

$$pc = \sqrt{K(K + 2mc^2)} .$$

Корпускулярно-волновой дуализм света

Свет есть материальный объект, обладающий как волновыми, так и корпускулярными свойствами. При определённых условиях, т.е. в ряде оптических явлений, свет проявляет свои **волновые свойства**, а в других **корпускулярные**.

Существуют оптические явления, которые могут быть объяснены качественно и количественно как волновой, так и корпускулярной теориями света. Например, давление, оказываемое светом при падении его на вещество.

Двойственная природа света получила название **корпускулярно – волнового дуализма света**.

В физике свет оказался первым объектом, у которого была обнаружена двойственная корпускулярно-волновая природа. Дальнейшее развитие физики значительно расширило класс таких объектов.

Лекция 3

Волновые свойства микрочастиц

Гипотеза де Бройля

Луи де Бройль выдвинул смелую гипотезу, согласно которой корпускулярно-волновой дуализм имеет универсальный характер. Каждая материальная частица наряду с корпускулярными обладает волновыми свойствами, причём соотношения, связывающие волновые и корпускулярные характеристики частицы, остаются такими же как и у фотона, т.е.

$$E = h\nu = \hbar\omega = \frac{hc}{\lambda} \quad \text{и} \quad p = \frac{h}{\lambda} = \frac{2\pi\hbar}{\lambda} : \quad \vec{p} = \vec{k}\hbar$$

Согласно гипотезе де Бройля, свободно движущейся частице, обладающей энергией E и импульсом p соответствует волновой процесс

с частотой $\omega = \frac{E}{\hbar}$ и длиной волны $\lambda_B = \frac{2\pi\hbar}{p}$.

Примечание: в настоящее время в СИ килограммом называют массу тела, для которой частота де Бройля точно равна

$$\nu_B = \frac{c^2}{2\pi\hbar} = \frac{(299792458)^2}{6,6260693 \cdot 10^{-34}} = 1,356392664 \cdot 10^{50} \text{ Гц}$$

Волна де Бройля распространяется в направлении скорости частицы. Она не является электромагнитной и имеет специфическую природу, для которой нет аналога в классической физике, но которая должна обладать такими свойствами волн как интерференция и дифракция

$$\text{Для нерелятивистской частицы} \quad K = \frac{m_0 v^2}{2} = \frac{p^2}{2m_0} \Rightarrow \lambda_B = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_0 K}}$$

$$\text{Для релятивистской частицы} \quad p = \frac{1}{c} \sqrt{K(K + 2m_0 c^2)} = \sqrt{2m_0 K} \sqrt{1 + \frac{K}{2m_0 c^2}}$$

$$\text{и} \quad \lambda_B^* = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_0 K} \sqrt{1 + \frac{K}{2m_0 c^2}}} = \frac{\lambda_B}{\sqrt{1 + \frac{K}{2m_0 c^2}}}$$

Оценим величину волн де Бройля для микро и макро-объектов.

Для нерелятивистского электрона, прошедшего ускоряющую разность потенциалов $U \sim 150 \text{ В}$ получаем

$$\lambda_B = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_e eU}} \approx 10^{-10} \text{ м}$$

Размеры атомов и расстояния между молекулами в твёрдых телах имеют тот же порядок $\sim 10^{-10} \text{ м}$.

Для макроскопического, но достаточно малого объекта – пылинки, масса которой $m_0 = 10^{-6} \text{ г}$, а скорость $v = 1 \text{ мм/с}$ получаем

$$\lambda_B = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{2\pi\hbar}{m_0 v} = 6,626 \cdot 10^{-22} \text{ м}$$

Такая длина волны значительно меньше наименьшего из известных в природе размеров – размеров атомного ядра, порядок которого 10^{-15} м .

Волновые свойства частиц проявляются максимальным образом в тех случаях, когда дебройлевская длина волны частицы сравнима с характерными размерами области движения частицы

$$\lambda_B \sim L,$$

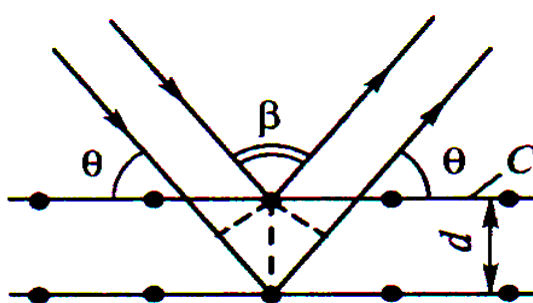
например, при взаимодействии электрона с атомами

В тех случаях, когда $\lambda_B \ll L$ (пример с пылинкой), волновые свойства частицы становятся несущественными, и для описания движения таких объектов необходимо пользоваться законами классической механики.

Дифракция микрочастиц

Первые экспериментальные исследования, подтвердившие волновую природу частиц были выполнены при исследовании дифракции электронов на кристаллической решётке. Дебройлевская длина волны электрона при ускоряющей разности потенциалов ~ 100 В имеет порядок $\sim 10^{-10}$ м. Расстояние между атомными плоскостями в кристалле имеет такой же порядок. Поэтому, так же как и в случае рентгеновского излучения, кристалл может играть роль дифракционной решётки для электронных волн.

Пусть имеется совершенный кристалл, обладающий идеальной, без каких либо нарушений кристаллической решёткой, и электроны падают на кристалл под углом скольжения θ по отношению к рассеивающему семейству плоскостей.



$\beta = \pi - 2\theta$ – угол между падающим и дифрагирующим пучками электронов.

При значении угла θ , удовлетворяющему условию Брэгга-Вульфа

$$2d \sin \theta = m \lambda_B \quad (m = 1; 2; 3; 4 \dots)$$

возникает интенсивный дифракционный максимум отражённой волны. Здесь d – расстояние между отражающими плоскостями (постоянная решётки кристалла).

Дифракционные максимумы появляются в тех случаях, когда разность хода волн, отражённых от соседних атомных плоскостей, равна целому числу длин волн де Бройля, т.е. имеет место интерференция.

С учётом преломления электронных волн в кристалле условие Брэгга-Вульфа принимает вид

$$2d \sqrt{n_e^2 - \cos^2 \theta} = n \lambda_B, \text{ где}$$

n_e – показатель преломления электронных волн в кристалле.

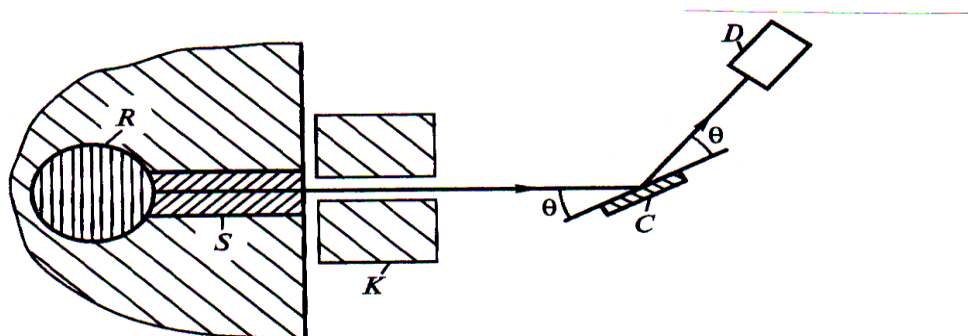
Результаты экспериментов по дифракции электронов, проведённые американцами Девиссоном и Джермером на монокристалле никеля, а также англичанином Дж.Томпсоном и советским физиком Тартаковским на тонкой поликристаллической фольге хорошо совпали с теоретической формулой Брэгга-Вульфа.

В 1921г. немецкий физик **Рамзауэр**, исследуя упругое рассеяние электронов на атомах аргона, обнаружил явление, являющееся электронным аналогом хорошо известного в оптике пятна Пуассона. Если энергия электрона такова, что его дебройлевская длина волны сравнима с диаметром атома, то в результате дифракции электрона на атоме электроны проходят через атом аргона, не испытывая какого либо отклонения от направления своего первоначального движения.

Позднее была обнаружена дифракция **тепловых нейтронов**, т.е. нейтронов, энергия которых сравнима с энергией $\frac{3}{2}kT$ при комнатной температуре $T \sim 300 \text{ К}$. Для таких нейтронов

$$\lambda_B = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_n E}} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{3m_n kT}} \sim 10^{-10} \text{ м}, \text{ где } m_n - \text{масса нейтрона.}$$

На рисунке приведена традиционная схема эксперимента по дифракции нейтронов.



Нейтроны, выходящие из ядерного реактора **R**, проходят через замедлитель **S** и теряют в нём часть своей энергии. Далее через коллимирующую систему **K**, формирующую узконаправленный пучок, они попадают на кристалл **C**, в котором и происходит дифракция. Дифрагировавший пучок нейтронов регистрируется детектором нейтронов **D**.

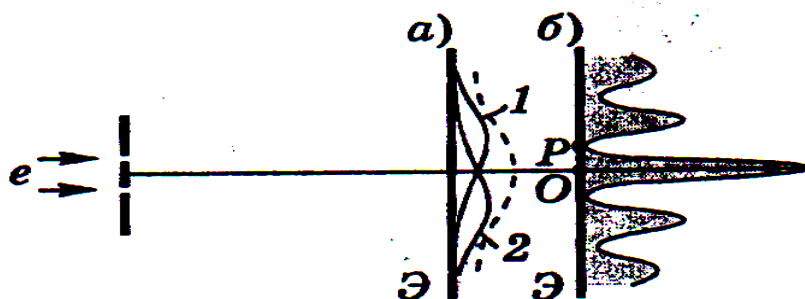
В дальнейшем были обнаружены при дифракции на кристаллах волновые свойства атомов гелия, молекул водорода и тяжёлых молекул фторфуллере $\text{C}_{60}\text{F}_{48}$. Таким образом гипотеза де Бройля имеет

универсальный характер для всех частиц, независимо от их природы и внутреннего устройства.

Парадоксальное поведение микрочастиц

Эксперименты по дифракции частиц вынуждают констатировать наличие парадокса: - «электрон – это одновременно частица и волна».

Физика – наука опытная. Можно, и во многих случаях полезно, проводить «мысленные эксперименты». Больше 50 лет назад был выполнен мысленный эксперимент, аналогичный опыту Юнга по изучению интерференции света от двух щелей.



После прохождения пучка электронов через две щели на экране образуется система максимумов и минимумов, положение которых можно рассчитать по формулам волновой оптики, если каждому электрону сопоставить дебройлевскую волну (экран *б*).

Электрон никогда не расщепляется.

Электрон может пройти либо через щель 1, либо через щель 2. Следовательно распределение их на экране должно быть суммой распределений 1 и 2 (пунктир на экране *а*), что совершенно не совпадает с интерференционной картиной. Более того, если сначала открыть щель 1, а потом постепенно открывать щель 2, увеличивая её ширину, то по здравому смыслу число электронов, приходящих в т. *Р* ежесекундно должно возрасти, а оно уменьшается до нуля. Т.е. дело обстоит так, что каждый электрон, проходя через какую-то щель, «чувствует» и соседнюю щель, корректируя своё поведение. Или подобно волне проходит сразу через обе щели (!?).

Для «объяснения» этих парадоксальных результатов был создан **математический аппарат**, который, совместно с полученными экспериментальными результатами, всегда правильно предсказывает наблюдаемые явления.

Этот аппарат ставит в соответствие каждой частице некоторую комплексную **пси-функцию** $\Psi(\vec{r}, t)$. Формально она обладает свойствами классических волн, поэтому её часто называют **волновой функцией**.

Уравнение волны де Бройля

Плоская волна частотой ω , распространяющаяся вдоль оси OX может быть представлена в комплексной форме

$$\xi(x,t) = A \exp(-i(\omega t - kx)), \text{ где } i - \text{мнимая единица}$$

Согласно гипотезе де Бройля, свободной частице с энергией E и импульсом p , движущейся вдоль оси OX , соответствует плоская волна

$$\Psi(x,t) = A \exp\left(-\frac{i}{\hbar} (E \cdot t - p \cdot x)\right),$$

распространяющуюся в том же направлении и описывающая волновые свойства частицы. Эту волну называют **волной де Бройля**.

Волны материи (т.е. волны де Бройля) в процессе распространения могут отражаться, преломляться, интерферировать и дифрагировать по обычным волновым законам.

Условие постоянства фазы волны де Бройля имеет вид

$$Et - p \cdot x = \text{const}$$

Дифференцируя это соотношение, находим фазовую скорость волны

$$v_{\phi} = \frac{dx}{dt} = \frac{E}{p} = \frac{m_0 c^2}{m_0 v} = \frac{c^2}{v}$$

Т.к. $v < c$, то фазовая скорость волны де Бройля оказывается больше скорости света в вакууме c .

Ограничения на скорость, накладываемые теорией относительности, справедливы лишь для процессов, связанных с переносом массы или энергии. Фазовая скорость волны де Бройля не характеризует ни один из этих процессов, поэтому на её величину не накладывается никаких ограничений. Она имеет чисто символическое значение и является принципиально ненаблюдаемой величиной.

Групповая скорость волны де Бройля
$$v_{GP} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d(\hbar\omega)}{d(\hbar k)} = \frac{dE}{dp}.$$

Согласно теории относительности связь между E и p для частицы с массой m определяется соотношением

$$E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4$$

Дифференцируя это соотношение, получаем

$$2E dE = 2pc^2 dp \quad \Rightarrow \quad \frac{dE}{dp} = \frac{pc^2}{E}$$

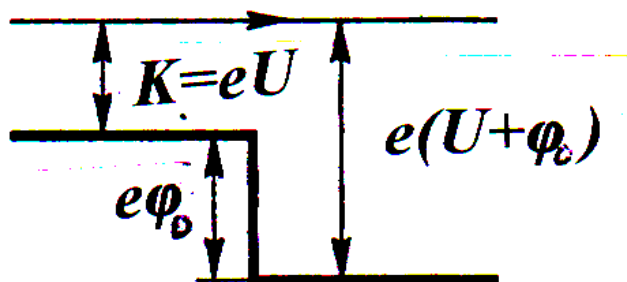
Т.о. $v_{гр} = \frac{pc^2}{E} = \frac{pc^2}{mc^2} = \frac{p}{m} = v$, т.е. групповая скорость волны де Бройля равна скорости движения частицы – v .

О преломлении дебройлевских волн

Пусть v_B – фазовая скорость волны де Бройля в вакууме, а v_C – в среде.

Считая, что подобно электромагнитным волнам частота ν не меняется при переходе из вакуума в среду, получаем для показателя преломления

$$n = \frac{v_B}{v_C} = \frac{\lambda_{BB}\nu}{\lambda_{BC}\nu} = \frac{\lambda_{BB}}{\lambda_{BC}}$$



Попадая из вакуума в кристалл(металл), электроны оказываются в потенциальной яме, где их энергия возрастает на «глубину» потенциальной ямы.

Так как $\lambda_B = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_e K}} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_e eU}}$ получаем $n = \frac{\sqrt{U + \varphi_0}}{\sqrt{U}} = \sqrt{1 + \frac{\varphi_0}{U}}$,

где

φ_0 – внутренний потенциал кристалла.

Задача

Нерелятивистская частица массы m_1 с кинетической энергией K_1 налетает на покоящуюся частицу с массой m_2 .

Найти дебройлевскую длину волны $\tilde{\lambda}$ обеих частиц в системе их центра масс.

Решение:

В Ц-системе импульсы обеих частиц равны по модулю и противоположны по направлению

$$\tilde{p}_1 = \tilde{p}_2 = \tilde{p} \quad \Rightarrow \quad \tilde{\lambda}_1 = \tilde{\lambda}_2 = \tilde{\lambda} = \frac{2\pi\hbar}{\tilde{p}}$$

Скорость центра масс (Ц-системы)

$$\vec{v}_c = \frac{m_1 \vec{v}_1 + m_2 \vec{v}_2}{m_1 + m_2} = \frac{m_1 \vec{v}_1}{m_1 + m_2}$$

Скорость частицы m_1 в Ц-системе $\vec{v} = \vec{v}_1 - \vec{v}_c$. Тогда

$$\tilde{p}_1 = m_1 \tilde{v}_1 = m_1 v_1 \left(1 - \frac{m_1}{m_1 + m_2} \right) = \frac{m_1 m_2 v_1}{m_1 + m_2}.$$

Учитывая, что $m_1 v_1 = \sqrt{m_1^2 v_1^2} = \sqrt{m_1 \frac{m_1 v_1^2}{2} 2} = \sqrt{2m_1 K_1}$ получаем
окончательно

$$\tilde{\lambda} = \frac{2\pi\hbar(m_1 + m_2)}{m_2 \sqrt{2m_1 K_1}}.$$

Лекция 4

Соотношения неопределённостей

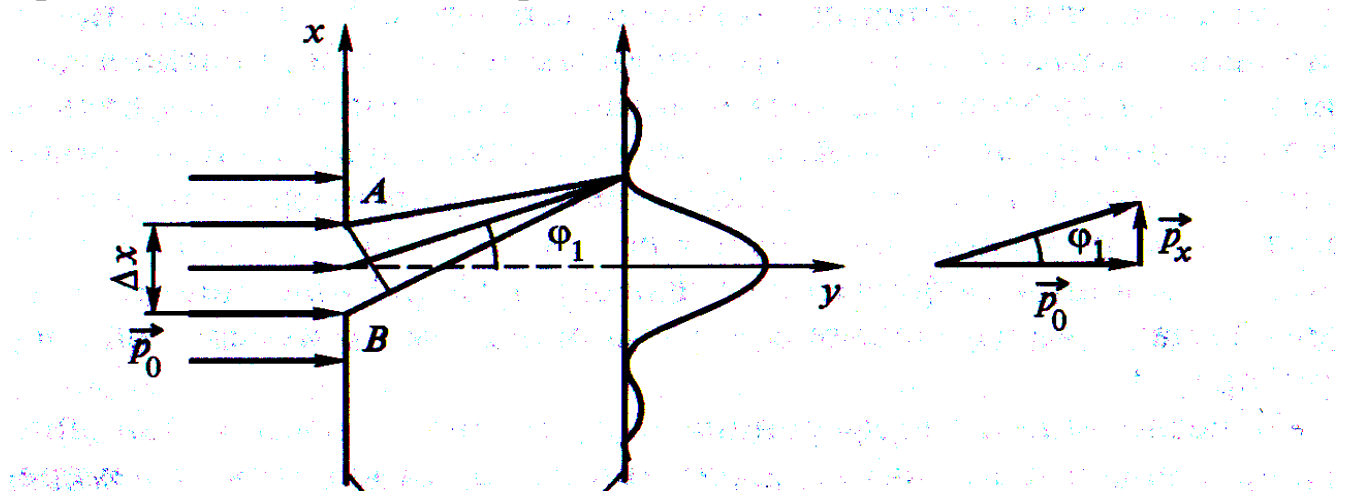
В классической физике исчерпывающее описание состояния частицы определяются динамическими параметрами, такими как координаты, импульс, момент импульса, энергия и др.

Отличие микрочастицы от макроскопической частицы заключается в том, что существует принципиальный предел точности, с которой подобные

параметры могут быть указаны и измерены. В частности, для описания движения микрочастицы понятие траектории в некоторых случаях оказывается неприемлемым (интерференция электрона от двух щелей).

Отличие микрочастицы от электромагнитной волны состоит в том, что свет, используя, например, полупрозрачное зеркало, можно разделить на две части и отдельно исследовать каждую из них. Микрочастица во всех опытах проявляет себя как единое целое. Нельзя наблюдать часть электрона или нейтрона.

Пусть электроны падают нормально на непрозрачную преграду, в которой имеется щель **AB** шириной Δx



Если падающие электроны обладают **определённым** импульсом p_0 ,

то этим электронам соответствует плоская волна с $\lambda_B = \frac{2\pi\hbar}{p_0}$ и волновым

вектором $\vec{k} = \frac{\vec{p}_0}{\hbar}$

Поскольку волна распределена по всему пространству, то каждый электрон до прохождения через щель имеет точно определённый импульс \vec{p}_0 ($p_x=0$, $p_y=p_0$, $p_z=0$) и неопределённую координату x .

При прохождении электрона через щель ситуация существенным образом меняется. **Неопределённость координаты x** становится равной ширине щели Δx , но при этом появляется **неопределённость проекции импульса Δp_x** , обусловленная дифракцией электронов на щели.

Согласно теории дифракции
$$\frac{\lambda_B}{\Delta x} = \sin \varphi_1 \approx \operatorname{tg} \varphi_1 = \frac{p_x}{p_0} .$$

Принимая, что $\Delta p_x \sim p_x$, получаем

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \approx 2\pi\hbar.$$

Более строгий вывод даёт следующий результат

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

Это соотношение называется **соотношением неопределённостей Гейзенберга**.

Для других координатных осей:

$$\Delta y \cdot \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2} \quad \text{и} \quad \Delta z \cdot \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2}.$$

В то же время не существует никаких принципиальных ограничений на точность определения координаты и проекции импульса на другую координатную ось, например, Δx и Δp_y .

Соотношение Гейзенберга задаёт теоретический предел точности измерения характеристик микрочастицы, но никак не связано с погрешностью измерений конкретных измерительных приборов.

На практике для оценочных расчётах часто используют соотношение

$$\Delta x \Delta p_x \geq \hbar$$

С помощью соотношения неопределённостей можно получать важные физические результаты, а также проводить численные оценки, не прибегая к точному но трудоёмкому решению задачи.

Рассмотрим для примера атом водорода и будем считать, что электрон движется вокруг ядра по круговой орбите радиуса r со скоростью v

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

Будем считать, что $\Delta x = r$, а $\Delta p = p = m_e v$. Тогда $r m_e v \geq \frac{\hbar}{2}$ и

$$r \geq \frac{\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} \approx 0,13 \cdot 10^{-10} \text{ м}$$

Следовательно, радиус орбиты электрона, т.е. радиус атома не может быть меньше найденного значения. В свою очередь это означает, что электрон не может упасть на ядро, т.е. атом является устойчивым образованием.

Кроме координат и проекций импульса существуют другие пары физических величин, которые не могут быть измерены одновременно точно. Особо следует выделить соотношение, которое называется **соотношением неопределённостей для энергии и времени**

$$\Delta E \cong \frac{\hbar}{\Delta t}$$

Система, имеющая среднее время жизни Δt , не может быть охарактеризована определённым значением энергии. Разброс энергии $\Delta E \cong \frac{\hbar}{\Delta t}$ возрастает с уменьшением времени жизни системы и частота

излучения также должна иметь неопределённость $\Delta \omega = \frac{\Delta E}{\hbar}$, т.е. спектральные линии должны иметь конечную ширину (уширение).

Следствия из соотношений неопределённостей:

1) Первым следствием из соотношения неопределённостей является **отсутствие траектории у микрочастиц** (для частиц с высокой энергией и

$\Delta x \approx 10^{-6}$ м неопределённость импульса $\Delta p_x = \frac{\hbar}{2\Delta x} \sim 10^{-28}$ кг·м/с, что значительно меньше значения самого импульса p . Это означает, что для этих частиц λ_B оказывается очень малой и для описания поведения таких частиц должна применяться классическая механика и можно говорить о траектории частицы).

2) **Отсутствие состояния покоя**. Если $\Delta x = a$, то $\Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2a}$.

Полагая $p_{x \text{ мин}} \approx \Delta p_{x \text{ мин}}$ находим минимальную (не равную нулю) энергию микрочастицы

$$E_{\text{мин}} = \frac{p_{x \text{ мин}}^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{8ma^2},$$

т.е. в квантовой механике микрочастица не может находиться в состоянии полного покоя.

3) Теряет смысл деление полной энергии частицы на кинетическую и потенциальную. Кинетическая энергия зависит от импульса частицы, а потенциальная энергия от её координаты. Но координата и импульс не могут одновременно иметь определённые значения. Равенство $E = K + U$ для мгновенных значений невозможно (в квантовой механике принято потенциальную энергию обозначать буквой U). Такое равенство справедливо лишь для средних значений энергии

$$\langle E \rangle = \langle K \rangle + \langle U \rangle.$$

Статистический смысл волновой пси-функции

Для микрочастиц из-за соотношения неопределённостей теряет смысл классическое определение состояния частицы (координаты и импульса).

В соответствии с корпускулярно-волновым дуализмом в квантовой теории состояние частицы задаётся **пси-функцией** $\Psi(\vec{r}, t)$, которая является комплексной величиной и формально обладает волновыми свойствами.

Движение любой микрочастицы по отдельности подчиняется вероятностным законам. Распределение вероятности, характеризующее это движение, проявляется в регистрации достаточно большого числа частиц. Это распределение оказывается таким же, как распределение интенсивности волны: там, где интенсивность волны больше, регистрируется и большее число частиц.

В квантовой теории постановка вопроса состоит не в точном предсказании событий, а в определении вероятностей этих событий, по которым по определённым правилам рассчитывают средние значения физических величин.

Пси-функция $\Psi(\vec{r}, t)$ и является той величиной, которая позволяет находить эти вероятности.

Квантовая механика базируется на нескольких постулатах. Правильность этих постулатов может быть подтверждена сравнением предсказаний квантовой механики с результатами экспериментов.

Первый постулат квантовой механики гласит: состояние частицы в квантовой механике описывается волновой функцией $\Psi(\vec{r}, t)$, являющейся функцией пространственных координат и времени и имеющей

вероятностный смысл т.е. определяющей вероятность нахождения частицы в различных областях пространства.

Волновая функция $\Psi(\vec{r}, t)$ в нерелятивистском случае находится из уравнения Шрёдингера.

Остальные постулаты будут приведены позже.

Если $w = \frac{dP}{dV}$ - плотность вероятности того, что в момент времени $t \geq 0$ частица может быть обнаружена в точке пространства $\mathbf{M} = \mathbf{M}(x, y, z)$ то

$$w = \Psi \Psi^* = |\Psi|^2, \text{ где}$$

Ψ^* - функция, комплексно сопряжённая с функцией Ψ , являющейся в общем случае комплекснозначной функцией.

Вероятность того, что частица будет обнаружена в любой области пространства конечного объёма V можно рассчитать

$$P = \int dP = \int_V w dV = \int_V |\Psi|^2 dV$$

Так как вероятность нахождения частицы во всём пространстве $V \rightarrow \infty$ равна единице, то

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

Иногда интеграл берётся не по всему пространству, а по той области, в которой Ψ -функция отлична от нуля.

Данное соотношение называют **условием нормировки волновой функции**, которое означает, что во всей области, где $\Psi \neq 0$, частица находится с достоверностью.

На волновую Ψ -функцию накладываются определённые ограничения – так называемые **условия регулярности волновой функции**:

волновая функция должна быть конечной, однозначной и непрерывной функцией пространственных координат, за исключением, быть может отдельных точек. Непрерывными должны быть также частные производные

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x}; \quad \frac{\partial \Psi}{\partial y} \quad \text{и} \quad \frac{\partial \Psi}{\partial z} \div$$

Принцип суперпозиции квантовых состояний: если частица может находиться в квантовом состоянии Ψ_1 , а также в другом квантовом состоянии Ψ_2 , то эта частица может также находиться в квантовом состоянии, описываемом волновой функцией

$$\Psi = C_1\Psi_1 + C_2\Psi_2, \text{ где}$$

C_1 и C_2 - в общем случае комплексные числа.

Для нормированных функций

$$|C_1|^2 + |C_2|^2 = 1$$

Уравнение Шрёдингера

В классической механике волновым уравнением называют уравнение вида

$$\nabla^2 \xi = \frac{1}{v^2} \cdot \frac{\partial^2 \xi}{\partial t^2}.$$

Например, для электромагнитной волны имеем

$$\nabla^2 E = \varepsilon_0 \mu \mu_0 \cdot \frac{\partial^2 E}{\partial t^2}.$$

В квантовой механике общее временное уравнение Шредингера позволяет определить в любой момент времени волновую функцию Ψ для частицы массой m_0 , движущейся в силовом поле $\vec{F} = -\text{grad}U$, описываемом скалярной потенциальной функцией $U(x, y, z, t)$

$$\nabla^2 \Psi - \frac{2m_0}{\hbar} U \Psi = -\frac{2m_0}{\hbar} i \frac{\partial \Psi}{\partial t}.$$

В большей части учебников это уравнение записывается в следующем традиционном виде:

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

$i = \sqrt{-1}$ - мнимая единица;

$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ - оператор Лапласа в декартовых координатах;

$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\operatorname{ctg} \theta}{r^2} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta}$ - оператор Лапласа в сферических координатах.

Уравнение Шредингера, как и законы классической механики Ньютона, законы термодинамики, уравнения Максвелла для электродинамики не может быть выведено. Его следует рассматривать как некоторое научное положение, справедливость которого подтверждается данными экспериментов в атомной и ядерной физике.

В квантовой механике существует класс задач о движении в силовых полях, для которых силовая функция не зависит от времени, т.е.

$$U(\vec{r}, t) \equiv U(\vec{r}).$$

Такие силовые поля называют стационарными силовыми полями. В этом случае силовая функция $U(\vec{r})$ имеет смысл потенциальной энергии частицы.

В стационарных полях квантовая система может находиться в состояниях с определённым значением энергии E . Эти состояния называют стационарными состояниями, а задачи о движении частиц, находящихся в таких состояниях – стационарными задачами квантовой механики.

Уравнение Шредингера для стационарных состояний имеет вид

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

КВАНТОВАЯ 2

Лекция 5

Стационарные задачи квантовой механики

Итак – уравнение Шрёдингера для стационарных состояний

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

а волновая функция частицы, находящейся в стационарном квантовом состоянии, имеет вид

$$\Psi(x, y, z, t) = \Psi(x, y, z) \cdot e^{-i\omega t} , \text{ где } \omega = \frac{E}{\hbar} .$$

Плотность вероятности обнаружения частицы при этом

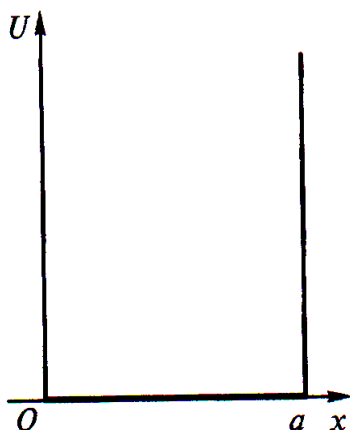
$$w = |\Psi(x, y, z, t)|^2 = |\Psi(x, y, z)|^2 \cdot |e^{-i\omega t}|^2 = |\Psi(x, y, z)|^2 \cdot e^{-i\omega t} \cdot e^{i\omega t} = |\Psi(x, y, z)|^2$$

т.е. не зависит от времени.

В стационарных состояниях от времени также не зависят вектор плотности потока вероятности \vec{j} и средние значения физических величин.

Условие нормировки волновой функции для таких состояний принимает вид

$$\int_{\infty} |\Psi(x, y, z)|^2 dV = 1$$

Частица в потенциальной яме с непроницаемыми стенками.Одномерная потенциальная яма

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

Потенциальная энергия частицы внутри ямы ($0 < x < a$) постоянна и равна нулю, а вне ямы обращается в бесконечность.

Уравнение Шредингера для одномерного движения частицы вдоль оси OX :

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2} [E - U(x)] \cdot \Psi = 0$$

Так как вне ямы $U(x) = \infty$, то для выполнения этого условия необходимо, чтобы $\Psi(x) \equiv 0$. В силу непрерывности функция $\Psi(x)$ должна обращаться в нуль и на границах ямы.

Таким образом, задача о движении частицы в одномерной прямоугольной потенциальной яме с непроницаемыми стенками сводится к решению уравнения

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2} E \cdot \Psi = 0 \quad \text{при } 0 < x < a$$

с граничными условиями $\Psi(0) = 0$ и $\Psi(a) = 0$.

Введя обозначение $k = \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2} E}$ получаем $\frac{d^2\Psi}{dx^2} + k^2\Psi = 0$.

Из теории колебаний известно, что решением этого уравнения является выражение

$$\Psi(x) = A \cdot \sin kx + B \cdot \cos kx \quad \text{или} \quad \Psi(x) = A \cdot \sin(kx + \varphi_0).$$

Используя граничное условие $\Psi(0) = 0$ получаем $B = 0$ (или $\varphi_0 = 0$) и

$$\Psi(x) = A \cdot \sin kx.$$

Используя граничное условие $\Psi(a) = 0$ получаем

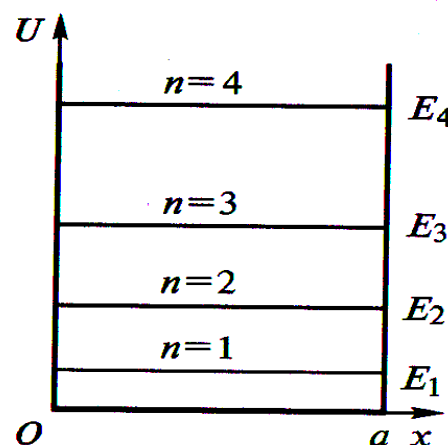
$$A \cdot \sin ka = 0 \quad \text{и если } A \neq 0 \text{, то } ka = \pi \cdot n, \quad \text{где } n = 1; 2; 3 \dots$$

Значение $n = 0$ не удовлетворяет условию задачи т.к. при этом $\Psi \equiv 0$, а это означает, что частица в яме отсутствует.

$$\text{Таким образом} \quad E_n = \frac{k^2 \hbar^2}{2m_0} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_0 a^2} n^2, \quad \text{где } n = 1; 2; 3 \dots$$

Видно, что частица, находящаяся в потенциальной яме, может иметь только дискретные, квантовые значения энергии.

Число n называют квантовым числом, а соответствующее ему значение E_n — уровнем энергии. Уровень E_1 называется основным состоянием, а все остальные — возбуждёнными ($n = 2$ — первое возбуждённое состояние).



Энергетическое расстояние между соседними уровнями

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_0 a^2} (2n+1)$$

Для молекулы газа с $m_0 \sim 10^{-27}$ кг в сосуде размером $a = 0,1$ м и $n > 1$ получаем

$$\Delta E_n \approx 7 \cdot 10^{-20} n \text{ эВ},$$

т.е. ΔE_n намного меньше энергии теплового хаотического движения молекулы ($kT \approx 2,6 \cdot 10^{-2}$ эВ) и дискретностью энергетического спектра движущейся молекулы можно пренебречь.

Для свободного электрона в атоме ($a \approx 10^{-10}$ м) получаем $\Delta E_n \approx 75n$ эВ и это сравнимо с энергией связи электрона в атоме $E_{\text{св}} \sim 10$ эВ.

Волновая функция частицы в одномерной прямоугольной потенциальной яме

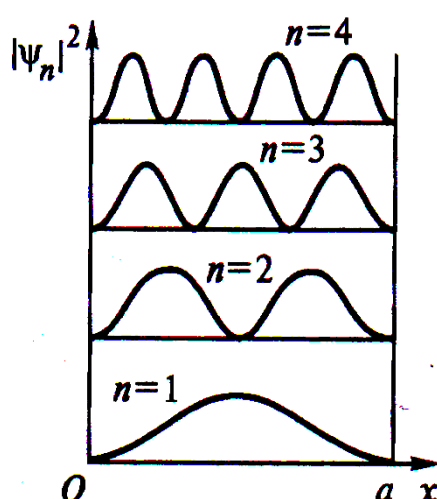
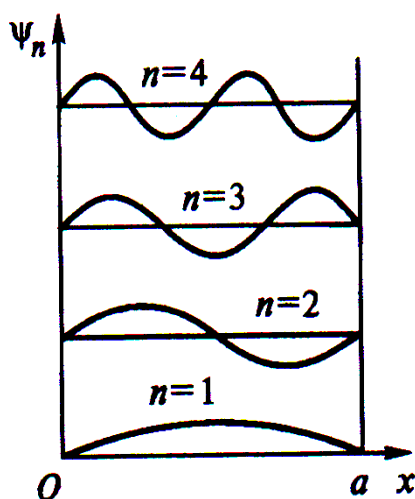
$$\Psi_n(x) = A \cdot \sin \frac{\pi n x}{a}$$

Множитель A находим из условия нормировки Ψ -функции:

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi_n(x)|^2 dx = A^2 \int_0^a \sin^2 \frac{\pi n x}{a} dx = A^2 \frac{a}{2} \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{a}} \quad \text{и тогда}$$

окончательно

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi n x}{a} \quad \text{при } (0 < x < a).$$



В основном состоянии частица с наибольшей вероятностью находится в середине ямы, а в 1-ом возбуждённом состоянии ($n = 2$) вероятность нахождения частицы в центре ямы равна нулю, хотя пребывание частицы в левой и правой половинах ямы равновероятно.

Плотность вероятности нахождения частицы в основном состоянии:

$$w_1(x) = |\Psi_1|^2 = \frac{2}{a} \sin^2 \left(\frac{\pi}{a} x \right),$$

в первом возбуждённом состоянии:

$$w_2(x) = |\Psi_2|^2 = \frac{2}{a} \sin^2 \left(\frac{2\pi}{a} x \right).$$

Вероятность нахождения частицы в области $x_1 < x < x_2$, где $x_2 < a$ в основном состоянии:

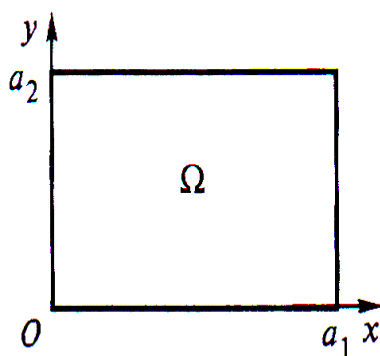
$$P_1(x_1 < x < x_2) = \frac{2}{a} \int_{x_1}^{x_2} \sin^2 \frac{\pi x}{a} dx,$$

в первом возбуждённом состоянии:

$$P_2(x_1 < x < x_2) = \frac{2}{a} \int_{x_1}^{x_2} \sin^2 \frac{2\pi x}{a} dx.$$

Двумерная потенциальная яма

Рассмотрим частицу, находящуюся в двумерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками.



$$U(x, y) = \begin{cases} 0, & (x, y) \in \Omega, \\ \infty, & (x, y) \notin \Omega, \end{cases}$$

Где $\Omega = \{(x, y) : 0 < x < a_1, 0 < y < a_2\}$ - прямоугольная область на плоскости (x, y) .

Вне потенциальной ямы $\Psi(x, y) \equiv 0$.

Поскольку движение частицы в яме вдоль осей ox и oy происходит независимо, то

$$\Psi(x, y) \equiv \Psi_1(x) \cdot \Psi_2(y),$$

а уравнение Шрёдингера имеет вид

$$\nabla^2 \Psi(x, y) + \frac{2m_0}{\hbar^2} E \cdot \Psi(x, y) = 0 \quad \text{или}$$

$$\Psi_2(y) \frac{\partial^2 \Psi_1(x)}{\partial x^2} + \Psi_1(x) \frac{\partial^2 \Psi_2(y)}{\partial y^2} = -\frac{2m_0}{\hbar^2} E \cdot \Psi_1(x) \Psi_2(y)$$

Разделив левую и правую часть на $\Psi_1(x) \cdot \Psi_2(y)$ получаем

$$\frac{1}{\Psi_1(x)} \cdot \frac{\partial^2 \Psi_1(x)}{\partial x^2} + \frac{1}{\Psi_2(y)} \cdot \frac{\partial^2 \Psi_2(y)}{\partial y^2} = -\frac{2m_0}{\hbar^2} E$$

Поскольку в правой части уравнения стоит постоянная величина, то и слева оба слагаемых должны быть постоянными величинами, и представив энергию E в виде двух слагаемых $E = E_1 + E_2$ можно разделить уравнение Шрёдингера для двумерной задачи на два одномерных уравнения:

$$\frac{\partial^2 \Psi_1(x)}{\partial x^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2} E_1 \cdot \Psi_1(x) = 0 \quad \text{и} \quad \frac{\partial^2 \Psi_2(y)}{\partial y^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2} E_2 \cdot \Psi_2(y) = 0$$

решения которых такие же как и для одномерного случая:

$$\Psi_{1,n1}(x) = \sqrt{\frac{2}{a_1}} \sin \frac{\pi n_1 x}{a_1} \quad \text{и} \quad \Psi_{2,n2}(y) = \sqrt{\frac{2}{a_2}} \sin \frac{\pi n_2 y}{a_2}, \quad \text{где } n_1; n_2 = 1, 2, 3,$$

...

В результате нормированная волновая функция частицы, находящейся в двумерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками:

$$\Psi_{n1,n2}(x, y) = \sqrt{\frac{4}{a_1 a_2}} \sin \frac{\pi n_1 x}{a_1} \sin \frac{\pi n_2 y}{a_2} \quad \text{а энергия}$$

$$E_{n1,n2} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_0} \left[\left(\frac{n_1}{a_1} \right)^2 + \left(\frac{n_2}{a_2} \right)^2 \right].$$

Если потенциальная яма квадратная ($a_1 = a_2 = a$) то

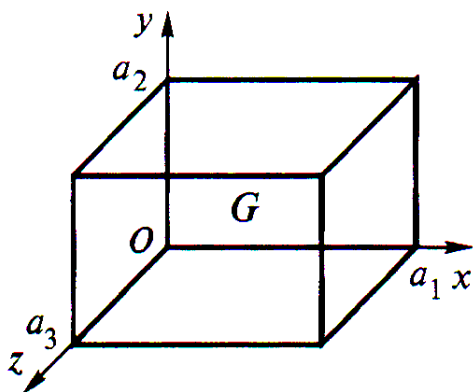
$$E_{n1,n2} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_0 a^2} (n_1^2 + n_2^2), \quad \text{где } n_1; n_2 = 1, 2, 3, \dots$$

Видно, что одному и тому же энергетическому уровню $E_{n1,n2}$, определяемому квантовыми числами n_1 и n_2 при $n_1 \neq n_2$ соответствуют два различных состояния частицы, описываемых волновыми функциями $\Psi_{n1,n2}$ и $\Psi_{n2,n1}$.

Энергетический уровень, которому соответствует несколько состояний частицы называется вырожденным энергетическим уровнем.

Энергетический уровень, которому соответствует только одно состояние частицы, называется невырожденным. Для квадратной потенциальной ямы невырожденными являются энергетические уровни, для которых $n_1 = n_2$.

Трёхмерная потенциальная яма (потенциальный ящик)



$$U(x, y, z) = \begin{cases} 0, & (x, y, z) \in G, \\ \infty, & (x, y, z) \notin G. \end{cases}$$

Здесь $G = \{(x, y, z) : 0 < x < a_1, 0 < y < a_2, 0 < z < a_3\}$ - внутренняя область прямоугольного параллелепипеда.

Вне ящика $\Psi(x, y, z) \equiv 0$, а внутри $\Psi(x, y, z) = \Psi_1(x) \cdot \Psi_2(y) \cdot \Psi_3(z)$.

Используя тот же метод, что и для двумерной ямы получаем

$$\frac{\partial^2 \Psi_1(x)}{\partial x^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2} E_1 \cdot \Psi_1(x) = 0; \quad \frac{\partial^2 \Psi_2(y)}{\partial y^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2} E_2 \cdot \Psi_2(y) = 0; \quad \frac{\partial^2 \Psi_3(z)}{\partial z^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2} E_3 \cdot \Psi_3(z) = 0$$

$$\Psi_{n_1, n_2, n_3}(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{a_1 a_2 a_3}} \sin \frac{\pi n_1 x}{a_1} \cdot \sin \frac{\pi n_2 y}{a_2} \cdot \sin \frac{\pi n_3 z}{a_3}$$

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_0} \left[\left(\frac{n_1}{a_1} \right)^2 + \left(\frac{n_2}{a_2} \right)^2 + \left(\frac{n_3}{a_3} \right)^2 \right], \quad \text{где}$$

$n_1, n_2, n_3 = 1, 2, 3, \dots$ - квантовые числа.

В кубическом потенциальном ящике ($a_1 = a_2 = a_3 = a$) получаем

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_0 a^2} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2).$$

Энергетические уровни в кубической потенциальной яме, для которых $n_1 = n_2 = n_3$, являются невырожденными, все остальные уровни вырождены.

Число вырожденных состояний определённого энергетического уровня называется кратностью вырождения уровня. Вопрос о кратности вырождения энергетических уровней в кубической яме рассматривается в задаче на семинарском занятии.

Плотность вероятности нахождения частицы в единице объёма для основного состояния в кубической яме:

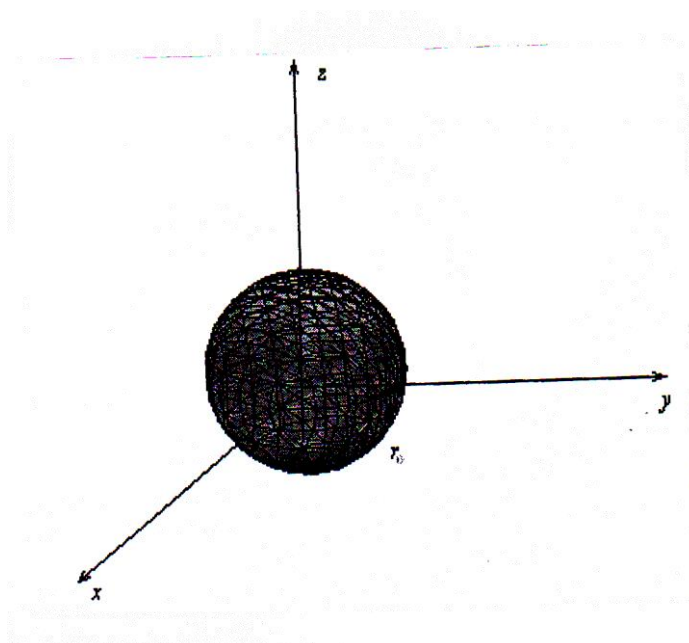
$$w_{1,1,1}(x, y, z) = \frac{8}{a^3} \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) \cdot \sin^2\left(\frac{\pi y}{a}\right) \cdot \sin^2\left(\frac{\pi z}{a}\right).$$

Вероятность нахождения частицы в основном состоянии в некоторой области $\{(x_1 < x < x_2), (y_1 < y < y_2), (z_1 < z < z_2)\}$, где $x_2, y_2, z_2 < a$

$$P = \frac{8}{a^3} \int_{x_1}^{x_2} \int_{y_1}^{y_2} \int_{z_1}^{z_2} \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) \cdot \sin^2\left(\frac{\pi y}{a}\right) \cdot \sin^2\left(\frac{\pi z}{a}\right) dx dy dz.$$

Сферически-симметричная потенциальная яма радиусом a

$U(r) = 0$ при $r < a$ и $U(r) = \infty$ при $r > a$.



Уравнение Шрёдингера для области $r < a$:

$$\nabla^2 \Psi + \frac{2m_0}{\hbar^2} E \cdot \Psi = 0$$

В сферически-симметричной яме Ψ -функция не зависит от угловых координат θ и φ и можно использовать только радиальную составляющую оператора Лапласа

$$\nabla_r^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r}, \text{ т.е.}$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \Psi}{\partial r} + \frac{2m_0}{\hbar^2} E \cdot \Psi = 0 \quad \text{или} \quad \frac{\partial^2 \Psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \Psi}{\partial r} + k^2 \Psi = 0, \quad \text{где} \quad k^2 = \frac{2m_0}{\hbar^2} E$$

Для решения этого уравнения используют подстановку $\Psi(r) = \frac{u(r)}{r}$.

Тогда

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi}{\partial r} &= \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial r} - \frac{1}{r^2} u(r) \\ \frac{\partial^2 \Psi}{\partial r^2} &= -\frac{1}{r^2} \frac{\partial u}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{2}{r^3} u(r) - \frac{1}{r^2} \frac{\partial u}{\partial r} \end{aligned}$$

После подстановки получаем

$$\frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + k^2 \cdot u(r) = 0$$

Решение этого уравнения имеет вид

$$u(r) = A \sin(kr + \varphi_0) \Rightarrow \Psi(r) = \frac{A}{r} \sin(kr + \varphi_0)$$

Так как $\Psi(r) \neq \infty$ при $r = 0$ то получаем $\varphi_0 = 0$.

Используя условие непрерывности Ψ -функции, имеем

$$\Psi(a) = \frac{A}{a} \sin ka = 0 \Rightarrow ka = \pi n, \quad \text{где} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

$$\underline{E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_0 a^2} n^2} \quad (\text{с учётом того, что} \quad k^2 = \frac{2m_0}{\hbar^2} E).$$

Коэффициент A находим из условия нормировки:

$$1 = \int_{V \rightarrow \infty} |\Psi(r)|^2 dV = \int_0^a |\Psi(r)|^2 4\pi r^2 dr = 4\pi A^2 \int_0^a \sin^2\left(\frac{\pi r}{a}\right) dr = 2\pi a A^2 \Rightarrow \underline{A = \frac{1}{\sqrt{2\pi a}}}$$

Таким образом

$$\underline{\Psi_n(r) = \frac{1}{r\sqrt{2\pi a}} \sin\left(\frac{\pi r}{a}\right)}.$$

Плотность вероятности (вероятность нахождения частицы в шаровом слое единичной толщины) в основном состоянии:

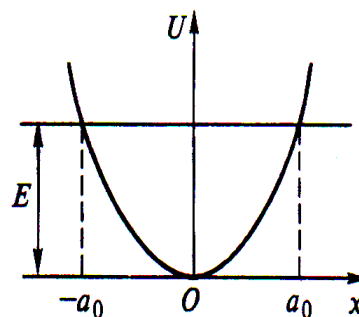
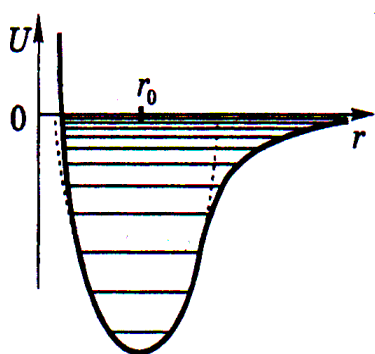
$$w_{\text{шл}} = |\Psi_1|^2 \cdot 4\pi r^2 = \frac{1}{r^2 2\pi a} \sin^2\left(\frac{\pi r}{a}\right) \cdot 4\pi r^2 = \frac{2}{a} \sin^2\left(\frac{\pi r}{a}\right) = \frac{1}{a} \left(1 - \cos \frac{2\pi r}{a}\right).$$

Лекция 6

Квантовый гармонический осциллятор (параболическая потенциальная яма)

Гармоническим осциллятором называется система, способная совершать гармонические колебания. Примером таких колебаний в квантовой механике являются колебания атомов в твёрдых телах, молекулах и т.д.

На рисунке слева изображена потенциальная энергия U взаимодействия атомов в двухатомной молекуле (типа NaCl) в зависимости от расстояния r между ядрами атомов. Из вида кривой $U(r)$ следует, что атомы в молекуле могут совершать колебания относительно равновесного расстояния r_0 между ядрами.



Квантово-механическая **задача** о гармоническом осцилляторе сводится к задаче о движении частицы вдоль оси ox в параболической потенциальной яме под действием возвращающей квазиупругой силы (рисунок справа) $F_x = -kx$.

Выражение для потенциальной энергии такого осциллятора имеет вид

$$U(x) = \frac{kx^2}{2} = \frac{m_0\omega^2}{2}x^2, \quad \text{где}$$

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m_0}}$$

- собственная частота классического гармонического осциллятора.

Графиком этой функции $U(x)$ является парабола.

Точки $x = -a_0$ и $x = a_0$, в которых полная энергия $E = U(x)$, являются для классической частицы точками поворота.

Амплитуду колебаний находим из выражения

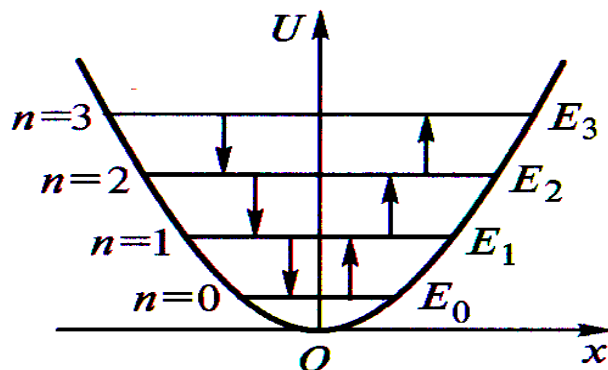
$$E = \frac{m_0\omega^2 a_0^2}{2} \Rightarrow a_0 = \sqrt{\frac{2E}{m_0\omega^2}}.$$

Уравнение Шрёдингера в данном случае имеет вид

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2} \left(E - \frac{m_0 \omega^2 x^2}{2} \right) \Psi = 0 .$$

Это уравнение имеет конечные, однозначные, непрерывные и гладкие решения (собственные функции) при собственных значениях E , равных

$$, E_n = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \text{ где } n = 0, 1, 2, 3, \dots$$



Энергетические уровни расположены на одинаковом расстоянии друг от друга $\Delta E = \hbar \omega$.

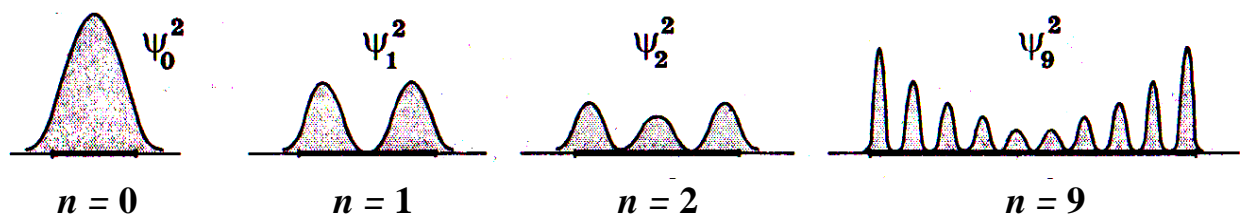
Минимальная энергия (её называют нулевой энергией)

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

Отличие от нуля минимальной энергии осциллятора характерно для всех квантовых систем и является следствием принципа неопределённостей.

Для квантового осциллятора возможны переходы лишь между соседними «стационарными» уровнями, при которых квантовое число n изменяется на единицу $\Delta n = \pm 1$ (правило отбора). При каждом из этих переходов испускается или поглощается фотон с энергией $\hbar \omega$, где ω — его циклическая частота.

На следующем рисунке приведены графики распределения плотности вероятности $\Psi^2(x)$ месторасположения частицы при $n = 0, 1, 2, 9$.

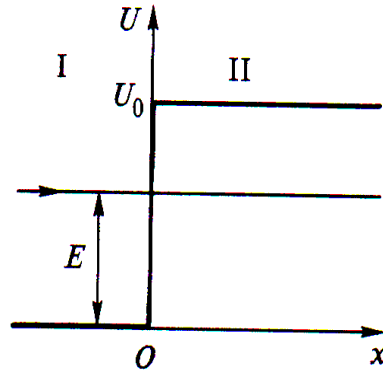


Жирными отрезками на оси ox показаны интервалы, на концах которых $E = U$. Классическая частица при колебаниях за пределы интервала заходить не может. Квантовая частица может быть обнаружена и вне пределов этих интервалов.

Одномерный потенциальный порог и барьер

Движение частицы в области потенциального порога

Потенциальным порогом (потенциальной стенкой) называют силовое поле, в котором потенциальная энергия частицы имеет вид



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

Пусть слева на порог налетает частица с полной энергией E . На языке квантовой теории это означает, что на порог слева «падает» дебройлевская волна

$$\Psi(x, t) = A \cdot e^{i(kx - \omega t)}.$$

Чтобы удовлетворить граничным условиям для Ψ и $\frac{\partial \Psi}{\partial x}$ при $x = 0$, должны существовать как прошедшая волна, так и отражённая. Так как ω в этих волнах одна и та же $\left(\omega = \frac{E}{\hbar}\right)$, то в расчётах можно ограничиться только координатной частью этих волн, а именно $\Psi(x)$.

Задача состоит в том, чтобы сначала найти амплитуды отражённой и падающей волн, а затем коэффициенты отражения R и пропускания D .

Уравнение Шрёдингера для частицы в данном силовом поле имеет вид:

$$\text{в области I } (x < 0) \quad \frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial x^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2} E \cdot \Psi_1 = 0$$

$$\text{в области II } (x > 0) \quad \frac{\partial^2 \Psi_2}{\partial x^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2} (E - U_0) \Psi_2 = 0$$

1). Низкий порог ($E > U_0$)

Общее решение уравнения Шрёдингера имеет вид:

$$\Psi_1(x < 0) = A_1 \cdot e^{ik_1 x} + B_1 \cdot e^{-ik_1 x}, \quad \text{где} \quad k_1 = \sqrt{\frac{2m_0 E}{\hbar^2}}$$

$$\Psi_2(x > 0) = A_2 \cdot e^{ik_2 x} + B_2 \cdot e^{-ik_2 x}, \quad \text{где} \quad k_2 = \sqrt{\frac{2m_0 (E - U)}{\hbar^2}}$$

Будем считать, что падающая волна характеризуется амплитудой A_1 , причём вещественной, а отражённая – амплитудой B_1 . В области II ($x > 0$) имеется только проходящая волна, поэтому $B_2 = 0$.

Из условия непрерывности Ψ и $\frac{\partial \Psi}{\partial x}$ в точке $x = 0$ следует, что

$$\Psi_1(0) = \Psi_2(0) \quad \text{или} \quad A_1 + B_1 = A_2 \quad \text{и}$$

$$\frac{\partial \Psi_1}{\partial x}(0) = \frac{\partial \Psi_2}{\partial x}(0) \quad \text{или} \quad A_1 k_1 + B_1 k_1 = A_2 k_2$$

Тогда

$$\frac{B_1}{A_1} = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \quad \text{и} \quad \frac{A_2}{A_1} = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}$$

Для определения коэффициентов R и D вводят понятие плотности потока вероятности \vec{j} , вектор которого определяется через волновую функцию следующим образом:

$$\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m_0} (\Psi \cdot \text{grad} \Psi^* - \Psi^* \text{grad} \Psi)$$

В соответствии с видом Ψ -функции для падающей, отражённой и прошедшей волн имеем:

$$j_{\text{пад}} \sim k_1 A_1^2, \quad j_{\text{отр}} \sim k_1 B_1^2 \quad \text{и} \quad j_{\text{прош}} \sim k_2 A_2^2$$

Теперь можно записать
для **коэффициента отражения**

$$R = \frac{j_{\text{отр}}}{j_{\text{пад}}} = \left(\frac{B_1}{A_1} \right)^2 = \left(\frac{1 - \sqrt{1 - U_0/E}}{1 + \sqrt{1 - U_0/E}} \right)^2$$

для **коэффициента пропускания**

$$D = \frac{j_{\text{прош}}}{j_{\text{пад}}} = \frac{k_2}{k_1} \left(\frac{A_2}{A_1} \right)^2 = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2} = \frac{4\sqrt{1 - U_0/E}}{(1 + \sqrt{1 - U_0/E})^2}$$

Видно, что $R + D = 1$, что и должно быть по определению. Коэффициенты R и D не зависят от направления движения частицы: слева направо или наоборот.

В классическом случае при $E > U_0$ должно быть $R = 0$.

Эффект надбарьерного отражения ($R > 0$) является чисто квантовым и объясняется наличием у частицы волновых свойств.

2). Высокий порог ($E < U_0$).

В этом случае $k_2 = \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2} (E - U_0)}$ является чисто мнимым.

Коэффициент отражения $R = \left| \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right|^2 = 1$ т.к. числитель и знаменатель –

величины комплексно-сопряжённые. Таким образом, отражение будет полным, а $D = 0$.

Но волновая функция при $x > 0$ не обращается в нуль, т.е. микрочастицы могут проникать в области, которые для макроскопических частиц недоступны.

Плотность вероятности нахождения частицы в области II определяется выражением

$$w_2(x > 0) = \frac{\partial P}{\partial x} = |\Psi_2(x)|^2 = \left| \frac{2k_1}{k_1 + ik_2} \right|^2 \cdot \exp(-2k_2x) = \frac{4k_1^2}{k_1^2 + k_2^2} \exp\left[-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m_0(U_0 - E)} \cdot x\right]$$

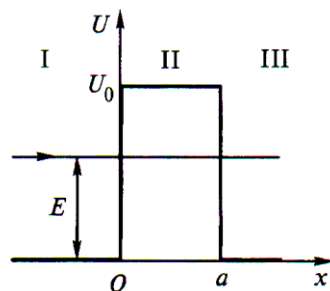
и зависит от массы m_0 , разности $(U_0 - E)$ и расстояния от границы порога.

Для электрона с $(U_0 - E) = 1 \text{ эВ}$ вероятность нахождения на расстоянии от порога сравнимым с размерами атома ($x = 10^{-10} \text{ м}$) достаточно велика, а на расстоянии в 10 раз большем ($x = 10^{-9} \text{ м}$) ничтожно мала.

Отражение хотя и является полным ($R = 1$) не обязательно происходит на самом пороге. Частица может проникнуть в область II, а затем выйти из неё (аналогично полному внутреннему отражению в оптике).

Прохождение частицы через потенциальный барьер.

Рассмотрим одномерный прямоугольный потенциальный барьер



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

Частица движется слева направо. Слева от барьера имеем падающую и отраженную волну, а за барьером только прошедшую волну.

Уравнение Шрёдингера для областей I, II и III имеет вид:

$$\frac{\partial^2 \Psi_1(x)}{\partial x^2} + k_1^2 \Psi_1(x) = 0$$

$$\frac{\partial^2 \Psi_2(x)}{\partial x^2} - k_2^2 \Psi_2(x) = 0$$

$$\frac{\partial^2 \Psi_3(x)}{\partial x^2} + k_1^2 \Psi_3(x) = 0$$

Где

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m_0 E}{\hbar^2}}, \quad k_2 = \sqrt{\frac{2m_0 (U_0 - E)}{\hbar^2}}$$

Волновые функции, являющиеся решением этих уравнений

$$\Psi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}$$

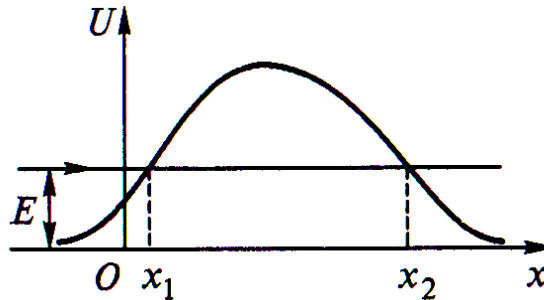
$$\Psi_2(x) = A_2 e^{k_2 x} + B_2 e^{-k_2 x}$$

$$\Psi_3(x) = A_3 e^{ik_1 x} + B_3 e^{-ik_1 x}$$

Из решения этой системы уравнений получают, применив некоторые упрощающие допущения, выражение для **коэффициента прозрачности D** прямоугольного барьера

$$D \cong \exp \left[-\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m_0(U_0 - E)} \right]$$

Для потенциального барьера произвольной формы



$$D = \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m_0[U(x) - E]} dx \right\}$$

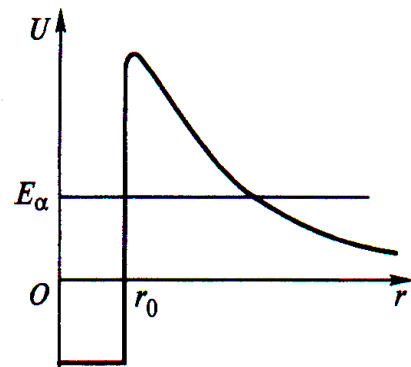
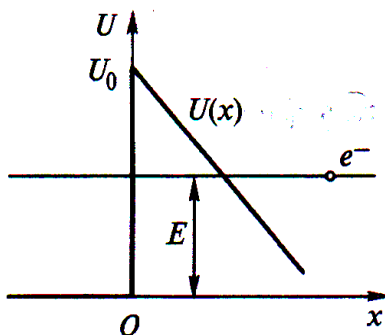
Пределы интегрирования x_1 и x_2 определяют из решения уравнения $U(x) = E$.

Туннельный эффект

Прохождение частицы через потенциальный барьер, высота которого превышает энергию частицы, получило название туннельного эффекта (частица, проходя под барьером, как бы движется в туннеле). При прохождении через барьер полная энергия частицы E не меняется.

Туннельный эффект представляет собой чисто квантовое явление.

Этим эффектом объясняются многие физические явления; например, холодная эмиссия электронов из металла (автоэмиссия), альфа-распад, спонтанное деление ядер и др.



На левом рисунке представлен потенциальный барьер треугольной формы, имеющий место на границе металл-вакуум в явлении холодной эмиссии электронов из металла. Электрон в металле находится в потенциальной яме глубиной U_0 . Если вблизи поверхности металла имеется электрическое поле напряжённостью \vec{E} , способствующее выходу электронов из металла, то потенциальная энергия электрона вблизи поверхности металла может быть представлена в виде

$$U(x) = U_0 - e \cdot |\vec{E}| \cdot x$$

При туннелировании электронов через этот барьер происходит их выход из металла даже при низких температурах.

На правом рисунке представлен потенциальный барьер α -частицы в поле ядра. На больших расстояниях r между α -частицей и ядром действуют силы кулоновского отталкивания и потенциальная энергия частицы

$$U(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze \cdot 2e}{r}, \quad \text{где}$$

Ze – заряд дочернего ядра; $2e$ – заряд α -частицы.

Внутри ядра ($r \leq r_0$) α -частица находится в потенциальной яме, выйти из которой она может только за счёт туннельного эффекта.

Прохождение частицы над барьером ($E > U_0$)

Частица массой m_0 падает на прямоугольный потенциальный барьер высотой U_0 и шириной a . Энергия частицы E больше высоты барьера.

В этом случае решение системы уравнений Шрёдингера для трёх областей: **I** – ($x < 0$), **II** – ($0 < x < a$), **III** – ($x > a$) даёт следующие значения для коэффициента прохождения D .

$$D = \left[1 + \frac{U_0}{4E(E - U_0)} \sin^2 \left(a \cdot \sqrt{\frac{2m_0(E - U_0)}{\hbar^2}} \right) \right]^{-1}$$

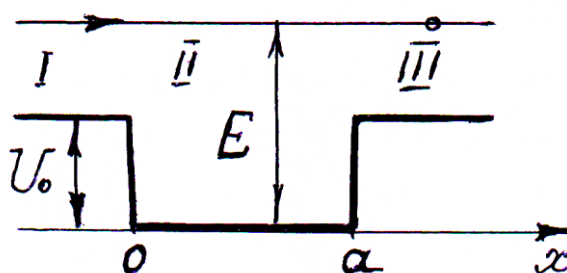
Частица беспрепятственно проходит над таким барьером ($D = 1$) при значениях энергии равных

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_0 a^2} n^2 + U_0, \quad \text{где } n = 1, 2, 3, \dots \quad (\sin = 0)$$

При других значениях энергии существует отличная от нуля вероятность отражения частицы от барьера.

Пролёт частицы над потенциальной ямой конечной глубины ($E > U_0$)

Частица пролетает над потенциальной ямой конечной глубины U_0 и ширины a слева направо вдоль оси ox .



Решая систему уравнений Шрёдингера для трёх областей, получаем выражение для коэффициента прохождения D , характеризующего вероятность прохождения частицы над ямой:

$$D = \left[1 + \frac{U_0}{4E(E - U_0)} \sin^2 \left(a \sqrt{\frac{2m_0 E}{\hbar^2}} \right) \right]^{-1}$$

Коэффициент прохождения D зависит от соотношения между энергией частицы и глубиной потенциальной ямы и в общем случае оказывается меньше единицы (частица может отразиться от потенциальной ямы даже если $E > U_0$). Данное явление, полностью отсутствующее в классической физике, объясняется наличием у частицы волновых свойств.

Частица не испытывает отражения на границах ямы ($D = 1$) только если $\sin = 0$. Это условие выполняется при значениях энергии частицы

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_0 a^2} n^2 > U_0, \text{ где } n = 1, 2, 3, \dots$$

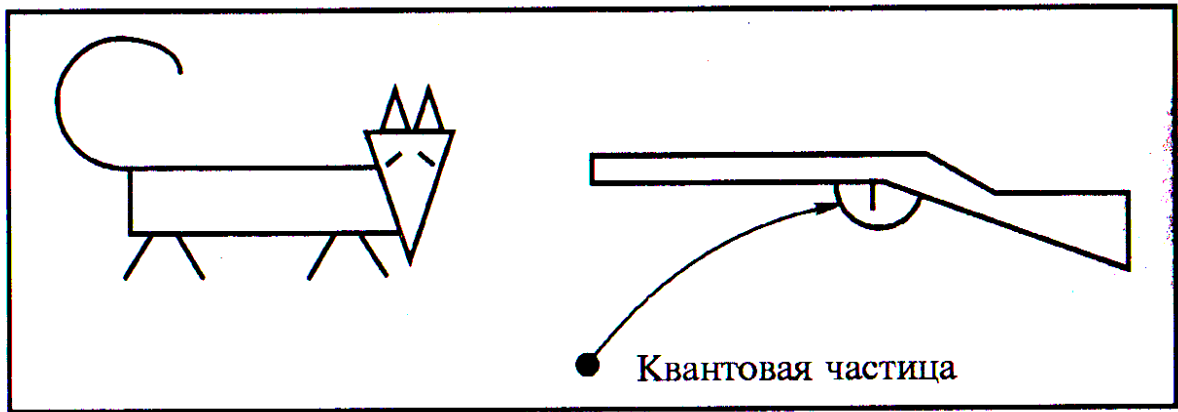
Рассмотренная модель поведения частицы вблизи симметричной прямоугольной потенциальной ямы конечной глубины хорошо качественно описывает движение электрона вблизи атома. В частности, проведённый анализ даёт квантово-механическое объяснение **эффекта Рамзауэра**, где наблюдалась аномальная прозрачность атомов инертных газов для пучка электронов при определённых значениях кинетической энергии ($K = E - U_0$).

Условие $a \sqrt{\frac{2m_0 E}{\hbar^2}} = \pi n$ можно представить в виде $a = \frac{\lambda_B}{2} \cdot n$

(λ_B – длина волны де Бройля электрона внутри ямы). Это условие определяет гашение за счёт интерференции волн, отражённых от двух границ ямы аналогично просветлению оптики при интерференции двух электромагнитных волн от двух сторон просветляющей тонкой плёнки.

КОШКА ШРЁДИНГЕРА

Кошка (или кот) Шрёдингера – герой кажущегося парадоксальным мысленного эксперимента Эрвина Шрёдингера, которым он хотел продемонстрировать неполноту квантовой механики при переходе от субатомных систем к макроскопическим.



Кошка помещена в закрытый ящик, где на неё направлен ствол ружья. В ящике находится также микрочастица, при попадании которой в курок ружья, ружьё стреляет и кошка погибает.

Если частица находится в первом квантовом состоянии, описываемом волновой функцией Ψ_1 , в котором вероятность обнаружить частицу в области вблизи курка равна нулю, то кошка в ящике жива.

Пусть в состоянии Ψ_2 вероятность нахождения частицы вблизи курка равна единице. В этом случае кошка мертва.

Согласно принципу суперпозиции

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \Psi_1 + \frac{1}{\sqrt{2}} \Psi_2$$

И непонятно жива или мертва кошка?

Системы, в которых формально объединены как классические так и квантовые объекты не всегда корректны для исследования.

Лекция 7

Операторы физических величин

Ранее было сказано, что состояние квантовой частицы определяется не координатами и импульсом, а заданием Ψ -функции, вид которой зависит от конкретного потенциального поля (1-ый постулат квантовой механики). Волновая функция, описывающая сама по себе распределение по координатам, определяет также распределение по импульсам и другим динамическим характеристикам частицы, таким как кинетическая энергия, момент импульса и др.

Таким образом Ψ -функция полностью определяет не только «положение» частицы, но и все её динамические характеристики.

Для получения информации о физических величинах, связанных с движущейся частицей, в квантовой механике разработан специальный математический аппарат, в котором используют операторы физических величин и результаты их действия на волновую функцию.

Оператором называют символическое обозначение математической операции, которую необходимо совершить с интересующей нас функцией. Примером оператора могут служить умножение на x , или на какую-либо функцию $f(x)$, дифференцирование по x т.е. $\frac{\partial}{\partial x}$; $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$, операторы набла - ∇ , лапласиан - ∇^2 и т.д.

В квантовой механике операторы принято обозначать буквами со «шляпкой», например, \hat{Q} , а его действие на некоторую функцию $f(x)$ записывают как $\hat{Q}f(x)$.

Некоторые свойства операторов:

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

$$(\hat{A} + \hat{B})f(x) = \hat{A}f(x) + \hat{B}f(x)$$

2). Под произведением операторов $\hat{A}\hat{B}$ понимают оператор, результат действия которого на любую функцию $f(x)$ равен

$$(\hat{A}\hat{B})f(x) = \hat{A}(\hat{B}f(x))$$

Т.е. функция $f(x)$ сначала подвергается действию оператора \hat{B} , а затем полученный результат – действию оператора \hat{A} .

Следует иметь ввиду, что не всегда $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$. Если такое равенство соблюдается, то это значит, что операторы \hat{A} и \hat{B} коммутируют друг с другом (коммутирующие операторы).

Пример некоммутирующих операторов – это x и $\frac{\partial}{\partial x}$:

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

3). Оператор \hat{A} называют линейным, если для любых двух функций f_1 и f_2 и любых постоянных a_1 и a_2 выполняется соотношение

$$\hat{A}(a_1 f_1 + a_2 f_2) = a_1 \hat{A}f_1 + a_2 \hat{A}f_2.$$

С линейностью операторов связан принцип суперпозиции состояний.

Оператором физической величины может быть только линейный самосопряжённый (эрмитов) оператор. Самосопряжённым называют оператор, который совпадает со своим сопряжённым оператором. В этом случае для произвольных функций Ψ_1 и Ψ_2 тождественно выполняется следующее интегральное равенство

$$\int_V f_1^* (\hat{A}f_2) dV = \int_V f_2 (\hat{A}f_1^*) dV$$

4). Если $\hat{A}f = \hat{B}f$ то $\hat{A} = \hat{B}$.

Представление физических величин операторами в квантовой механике

Второй постулат квантовой механики – каждой физической величине соответствует определённый линейный эрмитов оператор этой физической величины. При этом соотношения между операторами в квантовой механике имеют ту же структуру, что и соотношения между соответствующими им физическими величинами в классической механике.

1. Оператор координаты

$$\hat{x} = x ; \quad \hat{y} = y ; \quad \hat{z} = z .$$

$$\hat{\vec{r}} = \vec{e}_x \hat{x} + \vec{e}_y \hat{y} + \vec{e}_z \hat{z} .$$

2. Оператор импульса

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} ; \quad \hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} ; \quad \hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} ;$$

$$\hat{\vec{p}} = -i\hbar \vec{\nabla} = -i\hbar \left(\vec{e}_x \frac{\partial}{\partial x} + \vec{e}_y \frac{\partial}{\partial y} + \vec{e}_z \frac{\partial}{\partial z} \right) .$$

3. Оператор квадрата импульса

$$\hat{p}^2 = (\hat{p}_x)^2 + (\hat{p}_y)^2 + (\hat{p}_z)^2 = -\hbar^2 \nabla^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)$$

4. Оператор момента импульса

$$\vec{L} = [\vec{r}; \vec{p}] = \begin{vmatrix} \vec{e}_x & \vec{e}_y & \vec{e}_z \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{vmatrix}$$

$$\hat{L}_x = y\hat{p}_z - z\hat{p}_y = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right)$$

$$\hat{L}_y = z\hat{p}_x - x\hat{p}_z = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right)$$

$$\hat{L}_z = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$$

В сферической системе координат (r, θ, φ)

$$\hat{L}_x = i\hbar \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) ,$$

$$\hat{L}_y = -i\hbar \left(\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) ,$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} .$$

5. Оператор квадрата момента импульса

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x \hat{L}_x + \hat{L}_y \hat{L}_y + \hat{L}_z \hat{L}_z$$

В сферической системе координат (r, θ, φ)

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \nabla_{\theta, \varphi}^2, \text{ где}$$

$\nabla_{\theta, \varphi}^2 = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$ - угловая часть оператора Лапласа в сферической системе координат.

6. Операторы энергий

Кинетическая энергия в классической механике $K = \frac{m_0 v^2}{2} = \frac{p^2}{2m_0}$

В соответствии со вторым постулатом получаем

$$\hat{K} = \frac{\hat{p}^2}{2m_0} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2.$$

Для потенциальной энергии в стационарном силовом поле $U = \frac{kx^2}{2}$

получаем: $\hat{U} = \frac{k}{2} \hat{x}^2 = \frac{kx^2}{2} = U$. Это определение $\hat{U} = U$ справедливо не только для гармонического осциллятора но и в общем случае для частицы, движущейся в стационарном силовом поле, где её потенциальная энергия $U = U(x, y, z)$ определена в любой точке пространства.

Оператор полной энергии

$$\hat{H} = \hat{K} + \hat{U} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + U(x, y, z)$$

Этот оператор называют оператором функции **Гамильтона** или **гамильтонианом**, который является основным оператором квантовой механики, определяющим все особенности квантовой системы.

Уравнение Шрёдингера в операторной форме принимает вид:

$$\text{Временное} \quad - \quad \hat{H}\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

$$\text{Для стационарных состояний} \quad - \quad \hat{H}\Psi = E \cdot \Psi$$

Собственные функции и собственные значения операторов

Состояние, в котором физическая величина Q имеет определённое значение (так называемое **собственное состояние**), описывается Ψ -функцией, являющейся решением уравнения

$$\hat{Q}\Psi = Q \cdot \Psi$$

Примером такого уравнения является уравнение Шрёдингера для стационарного состояния.

Физический смысл могут иметь лишь такие решения этого уравнения, которые всюду конечные, однозначные, непрерывные и гладкие. Эти условия называются естественными или стандартными.

Функции, являющиеся решением данного уравнения и удовлетворяющие естественным условиям называются **собственными функциями** оператора \hat{Q} .

Те значения величины Q , при которых эти решения существуют, называются **собственными значениями** физической величины Q , например, собственные значения энергий в потенциальных ямах.

Набор (спектр) собственных значений физической величины Q иногда оказывается непрерывным, а иногда дискретным. Примером дискретности в микромире являются оптические спектры атомов, которые состоят из ряда отдельных тонких линий.

Рассмотрим несколько задач о нахождении спектров собственных значений:

1). Координата x

$$\hat{x}\Psi = x\Psi \Rightarrow \hat{x} = x \text{ и } x \in (-\infty; +\infty) \text{ т.е. спектр непрерывный.}$$

2). Проекция импульса p_x

$$\hat{p}_x \Psi = p_x \cdot \Psi \Rightarrow -i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial x} = p_x \cdot \Psi \Rightarrow \Psi = C \cdot \exp\left(-i \frac{p_x}{\hbar} x\right)$$

Функция Ψ определена при всех значениях p_x т.е. спектр собственных значений p_x непрерывен ($p_x \in (-\infty; +\infty)$).

3). Проекция момента импульса L_z

$$\hat{L}_z \Psi = L_z \cdot \Psi \Rightarrow -i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial \varphi} = L_z \cdot \Psi \Rightarrow \Psi = C \cdot \exp\left(i \frac{L_z}{\hbar} \varphi\right)$$

Собственные функции оператора \hat{L}_z должны быть однозначными функциями. Так как угловая координата φ является циклической переменной, то условие однозначности собственной функции сводится к условию её периодичности:

$$\Psi(\varphi + 2\pi) = \Psi(\varphi)$$

$$\text{Тогда } \exp\left(i \frac{L_z(\varphi + 2\pi)}{\hbar}\right) = \exp\left(i \frac{L_z \varphi}{\hbar}\right) \Rightarrow \exp\left(i \frac{L_z 2\pi}{\hbar}\right) = 1 \Rightarrow \frac{L_z 2\pi}{\hbar} = 2\pi \cdot m,$$

где $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$ Следовательно **спектр дискретный**.

$$\Psi_m(\varphi) = C \cdot \exp(im\varphi) = \frac{1}{2\pi} \exp(im\varphi)$$

Значение константы $C = \frac{1}{2\pi}$ выбрано из условия нормировки

$$\int_0^{2\pi} \Psi_m^* \cdot \Psi_m d\varphi = 1$$

4). Квадрат момента импульса L^2

Спектр собственных значений оператора \hat{L}^2 оказывается дискретным, т.е. уравнение $\hat{L}^2\Psi = L^2\Psi$ имеет решения только для значений

$$L^2 = \hbar^2 \cdot l(l+1), \text{ где } l = 0; 1; 2; 3; \dots$$

Собственные функции оператора \hat{L}^2 имеют вид:

$$\Psi_{l,m} = Y_{l,m}(\theta, \varphi) \quad l = 0; 1; 2; 3; \dots \quad m = 0; \pm 1; \pm 2; \pm 3; \dots \pm l.$$

Задача

Найти собственные значения оператора $\hat{A} = -\frac{\partial^2}{\partial x^2}$, принадлежащее собственной функции $\Psi = C \cdot \sin 2x$, где C – постоянная.

Решение:

$$\text{Т.к. } \hat{Q}\Psi = Q \cdot \Psi \text{ то } -\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = A \cdot \Psi.$$

$$\text{Но } \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -4C \cdot \sin 2x$$

$$\text{Следовательно } A = 4.$$

Лекция 8

Измерение физических величин в квантовых системах

Пусть известна волновая функция, описывающая состояние частицы в квантовой системе. Каков будет результат измерения физической величины Q в этой системе?

Третий постулат квантовой механики: в результате измерения физической величины Q в любой квантовой системе могут быть получены только такие значения, которые являются собственными значениями оператора \hat{Q} , соответствующего этой величине.

Этот постулат устанавливает связь между теорией и возможностью её экспериментальной проверки.

Так, например, используя найденные спектры собственных значений операторов \hat{L}^2 и \hat{L}_z , можно утверждать, что при измерении модуля

орбитального момента импульса атомов всегда будут получаться значения $L = \sqrt{L^2}$ из набора $L = \hbar\sqrt{l(l+1)}$ ($l = 0; 1; 2; \dots$), а для проекции момента импульса на направление z в экспериментах будут получены значения

$$L_z = m \cdot \hbar, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Какое конкретное собственное значение Q_n оператора \hat{Q} будет результатом измерения физической величины Q в квантовом состоянии, описываемом волновой функцией Ψ ?

Если представить совокупность большого числа одинаковых независимых квантовых систем, в которых тождественные частицы все находятся в одинаковых квантовых состояниях (квантовый ансамбль), то, измеряя физическую величину Q в различных системах этого ансамбля, мы всегда будем получать в результате измерения одно и то же значение Q_n если состояние частицы описывается волновой функцией Ψ_n , которое является одной из собственных функций оператора \hat{Q} .

Если волновая функция не будет являться собственной функцией оператора \hat{Q} , то в таком квантовом состоянии физическая величина Q не имеет определённого значения, и измерения в различных системах квантового ансамбля будут давать разные значения $Q_1, Q_2, Q_3, \dots Q_n$. При этом каждое значение Q_n в квантовом ансамбле будет обнаруживаться с определённой вероятностью P_n .

Если две разные физические величины a и b могут быть одновременно точно измерены, то соответствующие им операторы \hat{A} и \hat{B} должны быть коммутирующими операторами, т.е. для них должно выполняться соотношение $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$.

Определение среднего значения любой физической величины

В квантовых системах, в которых физическая величина Q не имеет определённого значения, имеет смысл находить среднее значение, т.е. математическое ожидание результатов измерений в серии из большого числа измерений

$$\langle Q \rangle = \sum_n P_n Q_n.$$

Для того, чтобы рассчитать вероятности P_n следует разложить волновую функцию Ψ в ряд по полной системе собственных функций Ψ_n оператора \hat{Q} :

$$\Psi = \sum_n C_n \Psi_n$$

Такое разложение всегда возможно и коэффициенты этого разложения вычисляются по формуле

$$C_n = \int_{V \rightarrow \infty} \Psi_n^* \cdot \Psi dV$$

Искомая вероятность P_n равна квадрату модуля $|C_n|^2$ из представленного выше разложения

$$P_n = |C_n|^2$$

С учётом того, что $Q_n \Psi_n = \hat{Q} \Psi_n$ получаем окончательную формулу

$$\langle Q \rangle = \int_{V \rightarrow \infty} \Psi^* \cdot (\hat{Q} \Psi) dV ,$$

которую часто рассматривают как **четвёртый постулат квантовой механики**.

Для одномерного случая : $\langle Q \rangle = \int \Psi^* \hat{Q} \Psi dx$.

Отметим, что если $\Psi = \Psi_n$, то получаем естественный результат

$$\langle Q \rangle = \int_{V \rightarrow \infty} \Psi_n^* (\hat{Q} \Psi_n) dV = Q_n \int_{V \rightarrow \infty} \Psi_n^* \Psi_n dV = Q_n$$

Квантовая механика позволяет дать численную оценку потенциальных возможностей того или иного поведения квантового объекта. И хотя вероятность того или иного результата измерения в квантовой механике относится к отдельному объекту, для экспериментального определения численного значения этой вероятности необходимо многократное повторение измерений в квантовом ансамбле одинаковых систем.

Задача 1

В некоторый момент частица находится в состоянии, описываемом Ψ -функцией, координатная часть которой $\Psi(x) = A \cdot \exp(ikx - x^2/a^2)$, где A и a - неизвестные постоянные.

Найти средние значения координаты x и проекции импульса p_x .

Решение:

a) в соответствии с 4-ым постулатом квантовой механики

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x \Psi \Psi^* dx = A A^* \int_{-\infty}^{+\infty} x \cdot \exp\left(-2 \frac{x^2}{a^2}\right) dx$$

Поскольку подинтегральная функция нечётная, то интеграл равен нулю
Следовательно

$$\langle x \rangle = 0$$

$$б) \quad \hat{p}_x \Psi = -i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial x} , \quad \text{где} \quad \frac{\partial \Psi}{\partial x} = \Psi(x) \cdot \left(ik - 2 \frac{x}{a^2} \right) .$$

Тогда в соответствии с 4-ым постулатом квантовой механики

$$\begin{aligned}\langle p_x \rangle &= \int \Psi^* (\hat{p}_x \Psi) dx = \int \Psi^* \left(-i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) dx = -i\hbar A A^* \int_{-\infty}^{+\infty} \left(ik - 2 \frac{x}{a^2} \right) \exp \left(-2 \frac{x^2}{a^2} \right) dx = \\ &= -i\hbar A A^* \int_{-\infty}^{+\infty} ik \cdot \exp \left(-2 \frac{x^2}{a^2} \right) dx + i\hbar A A^* \int_{-\infty}^{+\infty} 2 \frac{x}{a^2} \exp \left(-2 \frac{x^2}{a^2} \right) dx = -i\hbar A A^* \int_{-\infty}^{+\infty} ik \cdot \exp \left(-2 \frac{x^2}{a^2} \right) dx + 0\end{aligned}$$

(во втором интеграле подинтегральная функция нечётная).

Из условия нормировки Ψ -функции следует, что

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi \Psi^* dx = A A^* \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left(-2 \frac{x^2}{a^2} \right) dx = 1$$

В результате окончательно получаем

$$\langle p_x \rangle = \hbar k .$$

Задача 2

В момент времени $t = 0$ волновая функция частицы в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками имеет вид

$$\Psi(x) = A \cdot \sin \left(\frac{7\pi x}{2a} \right) \cdot \cos \left(\frac{3\pi x}{2a} \right).$$

Считая, что масса частицы равна m_0 , найдите среднюю кинетическую энергию частицы в данном состоянии. Укажите, суперпозицией каких состояний частицы в потенциальной яме является данное состояние. Найдите волновую функцию $\Psi(x, t)$.

Решение :

Воспользуемся формулой Эйлера:

$$\begin{aligned}\Psi(x) &= A \cdot \sin\left(\frac{7\pi x}{2a}\right) \cdot \cos\left(\frac{3\pi x}{2a}\right) = A \left(\frac{e^{\frac{i7\pi x}{2a}} - e^{-\frac{i7\pi x}{2a}}}{2i} \right) \cdot \left(\frac{e^{\frac{i3\pi x}{2a}} - e^{-\frac{i3\pi x}{2a}}}{2} \right) = \\ &= \frac{A}{2} \left(\frac{e^{\frac{i\pi x}{a} \cdot 5} - e^{-\frac{i\pi x}{a} \cdot 5}}{2i} + \frac{e^{\frac{i\pi x}{a} \cdot 2} - e^{-\frac{i\pi x}{a} \cdot 2}}{2i} \right) = \frac{A}{2} \left(\sin\left(\frac{\pi x}{a} \cdot 2\right) + \sin\left(\frac{\pi x}{a} \cdot 5\right) \right).\end{aligned}$$

Постоянный множитель A находим из условия нормировки:

$$1 = \int_0^a |\Psi(x)|^2 dx = \frac{A^2}{4} \int_0^a \left(\sin^2 \frac{2\pi x}{a} + \sin^2 \frac{5\pi x}{a} \right) dx = \frac{A^2}{4} \cdot 2 \cdot \frac{a}{2} \Rightarrow A = \sqrt{\frac{4}{a}}.$$

Для частицы массы m_0 в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими непроницаемыми стенками

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a} \cdot n\right) \quad \text{и} \quad E_n = \frac{\pi^2 \cdot \hbar^2}{2m_0 a^2} \cdot n^2.$$

Таким образом, функция $\Psi(x)$ принимает следующий окончательный вид:

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{1}{a}} \left(\sin \frac{\pi x}{a} \cdot 2 + \sin \frac{\pi x}{a} \cdot 5 \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi_2(x) + \Psi_5(x)]$$

В силу ортонормированности волновых функций Ψ_n вероятность обнаружения частицы в состоянии с волновой функцией Ψ_n равна квадрату коэффициента при Ψ_n . В данном случае $C_2 = C_5 = \frac{1}{\sqrt{2}}$ и $P_2 = P_5 = 1/2$.

Тогда

$$\langle K \rangle = \langle E \rangle = P_2 \cdot E_2 + P_5 \cdot E_5 = \frac{1}{2} \left(\frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_0 a^2} \cdot 4 + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_0 a^2} \cdot 25 \right) = \frac{29}{2} \cdot \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_0 a^2}.$$

Волновая функция $\Psi(x, t)$ определяется из условия, что для стационарного состояния

$$\Psi_n(x, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \cdot E_n t} \cdot \Psi_n(x).$$

Т.е.

$$\Psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[e^{-\frac{i}{\hbar}\cdot E_2\cdot t}\cdot\Psi_2(x)+e^{-\frac{i}{\hbar}\cdot E_5\cdot t}\cdot\Psi_5(x)\right].$$

КВАНТОВАЯ 3

Лекция 9

Ядерная модель атома

Резерфорд на основании результатов эксперимента по рассеянию α -частиц на атомах металлической фольги обосновал планетарную модель строения атома.

Согласно этой модели, атом состоит из тяжёлого положительно заряженного ядра очень малых размеров ($\sim 10^{-15}$ м), вокруг которого по некоторым орбитам движутся электроны. Радиусы этих орбит имеют размеры $\sim 10^{-10}$ м.

Наличие у электрона заряда делает планетарную модель противоречивой с точки зрения классической физики, т.к. вращающийся вокруг ядра электрон, как и любая ускоренно движущаяся заряженная частица, должен излучать электромагнитные волны. Спектр такого излучения должен быть непрерывным. В опытах наблюдается линейчатый спектр излучения атомов. Кроме того, непрерывное излучение уменьшает энергию электрона, и он из-за уменьшения орбиты обязан был бы упасть на ядро.

Постулаты Нильса Бора

Нильс Бор «спас» планетарную модель для атома водорода, сформулировав три постулата.

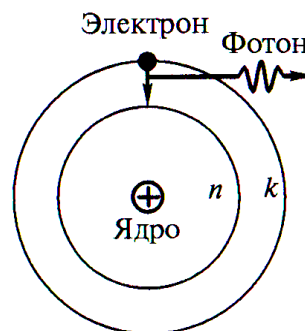
1. Электрон в атоме может двигаться только по определённым стационарным орбитам с определённым номером $n = 1; 2; 3; \dots$. Движущийся по стационарной замкнутой орбите электрон обладает неизменной полной энергией E_n .

2. Разрешёнными стационарными орбитами являются только те, для которых угловой момент импульса электрона равен целому кратному значению постоянной Планка

$$L_n = n\hbar \quad (n = 1; 2; 3; \dots).$$

3. Испускание или поглощение кванта излучения происходит при переходе атома из одного стационарного состояния в другое. Частота излучения

$$\omega_{nk} = \frac{E_k - E_n}{\hbar}$$



Расчёт атома водорода по Н.Бору

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_n^2} = \frac{m_e v_n^2}{r_n} \quad m_e - \text{масса электрона}$$

$$m_e v_n \cdot r_n = n\hbar \quad n = 1; 2; 3; \dots$$

Решая систему из этих двух уравнений получаем:

$$r_n = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} n^2 = a n^2, \quad \text{где } a = 0,529 \cdot 10^{-10} \text{ м} - \text{радиус 1-ой стационарной орбиты в атоме водорода}$$

$$v_n = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar n} \Rightarrow v_1 = 2,2 \cdot 10^6 \text{ м/с}$$

Кинетическая энергия электрона $K = \frac{m_e v_n^2}{2} = \frac{m_e e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2 n^2}$

Потенциальная энергия электрона $U = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_n} = -\frac{m_e e^4}{16\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2 n^2}$

Полная энергия электрона на n -ой орбите

$$E = K + U = -\frac{m_e e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{13,6}{n^2} \text{ эВ}$$

Для частоты излучения при переходе из k в n состояние получаем $\omega_{nk} = R_\omega \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2} \right)$, где $R_\omega = \frac{m_e e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^3} = 2,07 \cdot 10^{16} \text{ с}^{-1}$ - постоянная Ридберга

Существуют также постоянные Ридберга для ν и λ :

$$R_\nu = \frac{R_\omega}{2\pi} \quad \text{для} \quad \nu_{nk} = R_\nu \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2} \right);$$

$$R_\lambda = \frac{R_\omega}{2\pi c} \quad \text{для} \quad \frac{1}{\lambda_{nk}} = R_\lambda \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2} \right)$$

Для водородоподобных атомов (ион гелия He^+ с $Z = 2$, двукратно-ионизованный литий Li^{++} с $Z = 3$, трёхкратноионизованный бериллий Be^{+++} с $Z = 4$ и т.д.) радиусы орбит электрона оказываются в Z раз меньше, чем в атоме водорода, а энергетический спектр водородоподобного иона получается умножением на Z^2

$$E_n = -\frac{13,6}{n^2} Z^2 \text{ эВ.}$$

Квантовая теория атома

Хотя теория Бора даёт хорошие результаты для водородоподобных атомов, она не может рассматриваться как законченная теория атомных явлений.

С позиций современной физики атом является физической системой, которая заведомо не может быть описана классической теорией, не учитывающей волновых свойств движущегося в атоме электрона, так как длина волны де Бройля такого электрона сравнима с размерами атома.

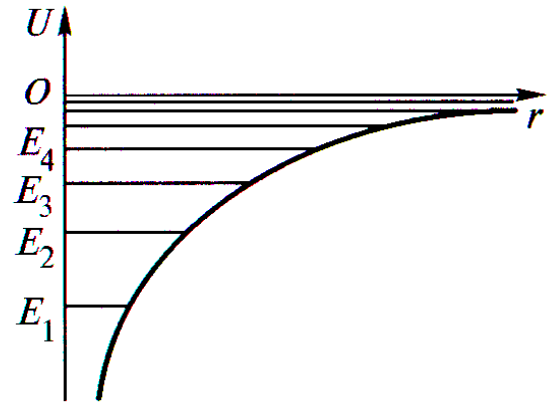
Потенциальная энергия взаимодействия электрона с ядром водородоподобного атома

$$U(r) = -\frac{Z \cdot e^2}{4\pi\epsilon_0 r}, \quad \text{где}$$

r – расстояние между электроном и ядром, которое в первом приближении будем считать точечным.

Движение электрона в таком поле можно рассматривать как движение в некоторой сферической потенциальной яме.

Спектр энергий электрона должен быть дискретным, т.е. состоять из отдельных энергетических уровней со значениями полной энергии электрона E_1 ; E_2 ; E_3 и т.д.



Уравнение Шрёдингера ($\hat{H}\Psi = E \cdot \Psi$) имеет вид

$$\nabla^2 \Psi + \frac{2m_e}{\hbar^2} \left(E + \frac{Z \cdot e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \cdot \Psi = 0$$

Решение этого уравнения проводят в сферической системе координат r, θ, φ , центр которой совпадает с центром ядра атома. В такой системе $\Psi = \Psi(r, \theta, \varphi)$, а оператор Лапласа

$$\nabla^2 = \nabla_r^2 + \frac{1}{r^2} \nabla_{\theta, \varphi}^2, \quad \text{где} \quad \nabla_r^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right), \quad \nabla_{\theta, \varphi}^2 = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

Используя оператор квадрата момента импульса в сферической системе координат

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \cdot \nabla_{\theta, \varphi}^2$$

уравнение Шрёдингера преобразуют к виду

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \cdot \nabla_r^2 \Psi + \frac{1}{2m_e r^2} \hat{L}^2 \Psi - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \Psi = E \cdot \Psi$$

Решение этого уравнения ищут в виде произведения двух функций с разделяющимися переменными

$$\Psi = X(r) \cdot Y(\theta, \varphi).$$

С учётом естественных требований, налагаемых на Ψ -функцию она должна быть однозначной, конечной, непрерывной и гладкой.

В процессе решения обнаруживается, что этим требованиям можно удовлетворить при любых положительных значениях энергии E , но в области отрицательных значений E – только при дискретных значениях, а именно, если

$$E_n = -\frac{m_e e^4}{32\pi^2 \varepsilon_0^2 \hbar^2} \frac{Z^2}{n^2}, \quad \text{где } n = 1; 2; 3; \dots,$$

что соответствует связанным состояниям электрона в атоме.

Таким образом решение уравнения Шрёдингера приводит в случае $E < 0$ к тому же результату, что и теория Нильса Бора но без использования каких либо дополнительных постулатов.

Основное различие заключается в интерпретации состояний электрона: в теории Бора – это движение по стационарным круговым орбитам, а в решении уравнения Шрёдингера орбиты теряют физический смысл – их место занимают Ψ -функции.

Лекция 10

Волновые функции и квантовые числа

Собственные функции уравнения Шрёдингера для атома, т.е. Ψ -функции содержат, как выяснилось, три целочисленных параметра – n, l, m :

$$\Psi = \Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$$

n - главное квантовое число (то же, что и в выражениях для E_n)
 $n = 1; 2; 3; \dots$

l – орбитальное (азимутальное) квантовое число, определяющее модуль орбитального момента импульса движущегося в атоме электрона.

В квантовых состояниях с заданным значением главного квантового числа n орбитальное квантовое число может иметь следующие значения:

$$l = 0; 1; 2; 3; \dots; (n - 1).$$

Стационарные волновые функции $\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$, описывающие различные квантовые состояния атома, являются собственными функциями не только оператора полной энергии \hat{H} , но и оператора квадрата момента импульса \hat{L}^2 , т.е.

$$\hat{L}^2 \Psi_{nlm} = l(l+1)\hbar^2 \cdot \Psi_{nlm}.$$

Следовательно, в любом квантовом состоянии атом обладает определённым значением квадрата момента импульса.

Орбитальное квантовое число l однозначно определяет модуль орбитального момента импульса движущегося в атоме электрона:

$$L = \hbar \sqrt{l(l+1)}$$

Данное условие квантования момента импульса не совпадает с квантованием момента импульса в теории Н.Бора ($L = n\hbar$).

Принципиальное отличие этих соотношений состоит в том, что в квантовой теории возможны состояния с $L = 0$, а при классическом описании движения электрона в атоме по определённой орбите в любом состоянии атом должен обладать ненулевым моментом импульса.

Эксперименты подтверждают существование квантовых состояний атома с нулевыми орбитальными моментами. Следовательно, опыт подтверждает, что только отказ от классического траекторного способа описания движения электрона в атоме позволяет правильно рассчитать и предсказать свойства атома.

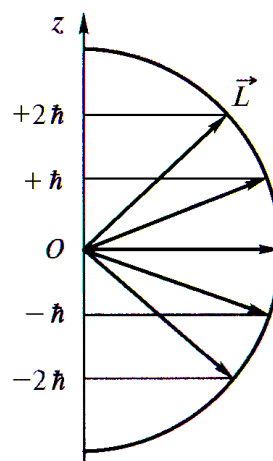
Вероятностный способ описания движения частиц является единственно правильным способом описания свойств атомных систем – таков вывод современной физики.

Если атом переходит из одного квантового состояния в другое с испусканием (поглощением) фотона излучения, то возможны лишь такие переходы, для которых орбитальное квантовое число l изменяется на единицу. Это правило, согласно которому для оптических переходов $\Delta l = \pm 1$, называется **правилом отбора**. Наличие этого правила обусловлено тем, что фотон уносит или вносит не только квант энергии, но и вполне определённый момент импульса, изменяющий орбитальное квантовое число электрона всегда на единицу.

m - магнитное квантовое число

В квантовом состоянии с заданным значением орбитального квантового числа l магнитное квантовое число может принимать $(2l + 1)$ различных значений из ряда:

$$m = 0; \pm 1; \pm 2; \pm 3; \dots \pm l$$



Физический смысл магнитного квантового числа m вытекает из того, что волновая функция $\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$, описывающая квантовое состояние электрона в атоме водорода, является также и собственной функцией оператора проекции импульса \hat{L}_z

$$\hat{L}_z \Psi_{nlm} = m \cdot \hbar \cdot \Psi_{nlm}.$$

Из определения собственной функции (см. Лекцию 7) получаем

$$L_z = m \cdot \hbar$$

Эту формулу называют **формулой пространственного квантования.**

Символы состояний

Различные состояния электрона в атоме принято обозначать малыми буквами латинского алфавита в зависимости от значения орбитального квантового числа l

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

Значение главного квантового числа n указывают перед символом состояния с данным числом l . Например, электрон, имеющий $n = 3$ и $l = 2$ обозначают символом $3d$. Последовательность имеет следующий вид:

1s (для $n = 1$) 2s, 2p (для $n = 2$) 3s, 3p, 3d (для $n = 3$) и т.д.

Примеры некоторых нормированных волновых функций Ψ_{nlm} для ряда квантовых состояний водородоподобных атомов

n	l	m	Ψ_{nlm}	Состояние
1	0	0	$\frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a} \right)^{3/2} \exp(-\rho)$	1s
2	0	0	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a} \right)^{3/2} (2 - \rho) \exp\left(-\frac{\rho}{2}\right)$	2s
2	1	0	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a} \right)^{3/2} \rho \exp\left(-\frac{\rho}{2}\right) \cos \theta$	2p

Здесь $\rho = Z \frac{r}{a}$. Z – заряд ядра, r – расстояние от центра атома,

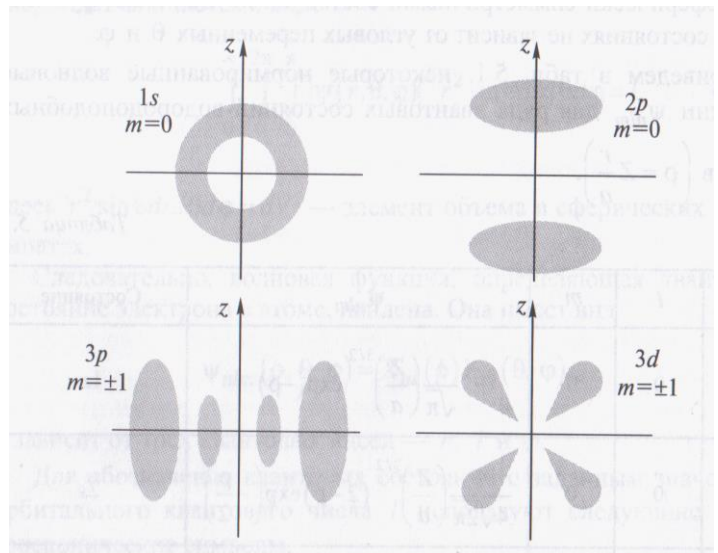
$$a = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} = 0,529 \cdot 10^{-10} \text{ м} - \text{универсальная константа, равная 1-ому}$$

боровскому радиусу электрона в атоме водорода.

Образ атома в квантовой теории может быть представлен в виде облака плотности вероятности

$$w = |\Psi_{nlm}|^2$$

Пространственное распределение плотности вероятности обнаружения электрона в различных квантовых состояниях атома водорода можно представить следующим образом



Орбитальный магнитный момент

Так как движущийся в классической теории Бора вокруг ядра электрон является заряженной частицей, то такое его движение обуславливает протекание некоторого замкнутого тока в атоме, который можно охарактеризовать орбитальным магнитным моментом \vec{p}^M .

Для расчёта орбитального магнитного момента в квантовой теории следует определять пространственную плотность электрического тока \vec{j}_e через плотность потока вероятности \vec{j}

$$\vec{j}_e = -e \cdot \vec{j}, \quad \text{где} \quad \vec{j} = \frac{i\hbar}{2m_e} (\Psi \cdot \text{grad}\Psi^* - \Psi^* \cdot \text{grad}\Psi).$$

Связь механического и магнитного моментов определяется гиромангнитным отношением

$$\Gamma_0 = \frac{p^M}{L}.$$

Точный квантово-механический расчёт даёт (причём это же выражение получается и из теории Бора)

$$\Gamma_0 = \frac{e}{2m_e}.$$

Тогда

$$p^M = \Gamma_O \cdot L = \mu_B \sqrt{l(l+1)} \quad . \quad \text{где}$$

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 0,927 \cdot 10^{-23} \text{ Дж/Тл} \quad - \text{ магнетон Бора} \quad - \text{ универсальная}$$

постоянная, служащая единицей измерения магнитных моментов атомов.

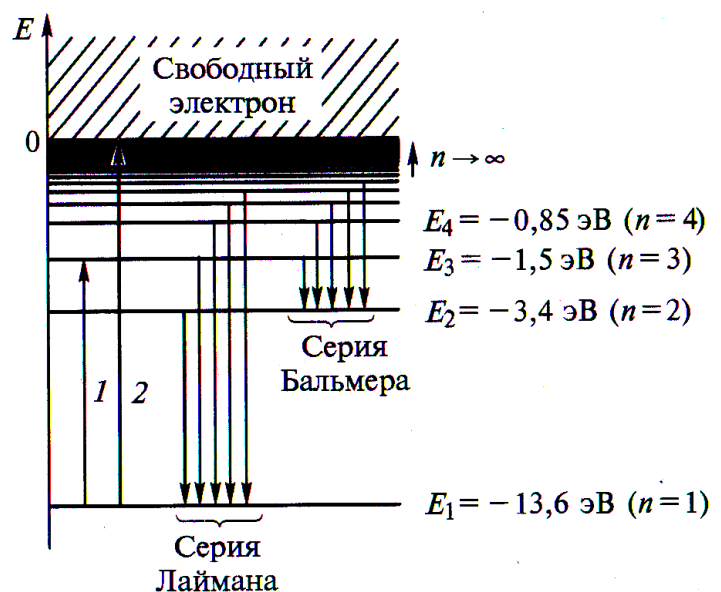
Возможные значения проекции магнитного момента атома на выделенное направление Z

$$p_Z^\mu = m \cdot \mu_B .$$

Энергетический спектр электрона в атоме водорода

1 — переход в возбуждённое состояние

2 — ионизация атома
 $W_i = -E_1 = 13,6 \text{ эВ}$



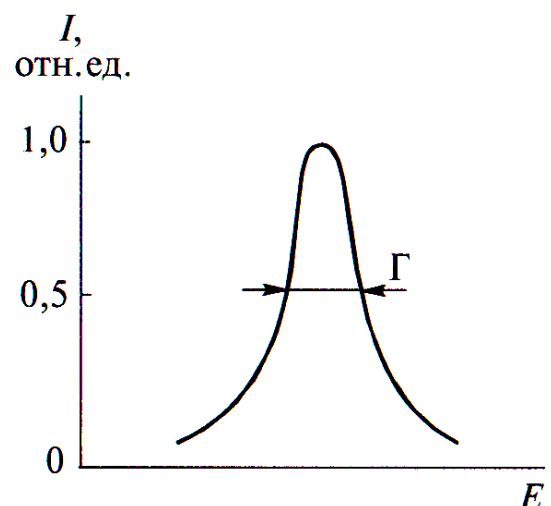
Ширина спектральных линий

Линии в спектре излучения атомов не являются бесконечно узкими — это соответствовало бы значению неопределённости $\Delta E = 0$, т.е. точно определённой энергии кванта излучения.

Спектральные линии, наблюдаемые в эксперименте, имеют конечную, так называемую естественную ширину линии Γ , которая представляет собой разброс энергий фотонов относительно некоторого среднего значения, характеризующего центр линии.

Эта ширина связана с временем жизни атома в возбуждённом состоянии соотношением

$$\Gamma \cdot \tau \approx \hbar$$



Экспериментальное определение ширины Γ позволило оценить время $\tau \approx 10^{-7} \div 10^{-8} \text{ с.}$

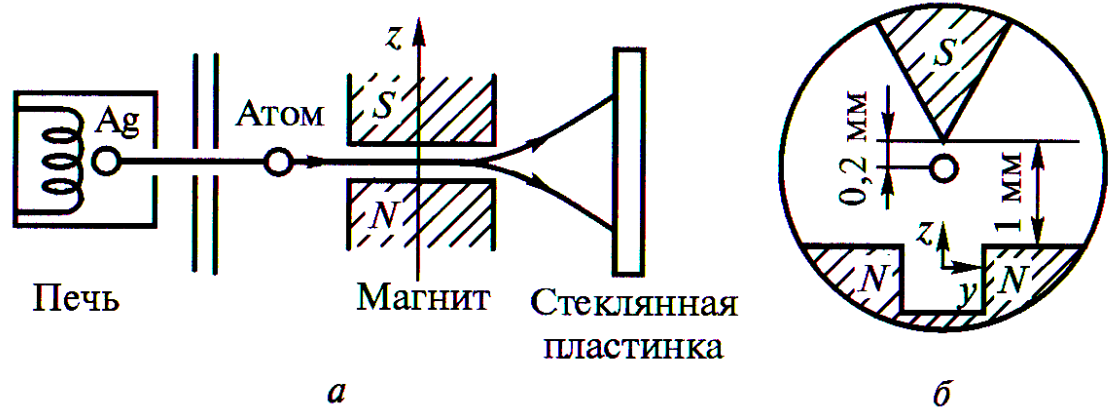
Лекция 11

Спин электрона

Пространственное квантование атома утверждает дискретность проекции магнитного момента атома на направление внешнего магнитного поля

$$p_z^M = m\mu_B.$$

Продemonстрировать данное явление впервые удалось экспериментально **Штерну и Герлаху** в 1922 г.



a – схема установки; b – форма межполюсного канала магнита

Узкий атомный пучок пропускают через неоднородное магнитное поле с существенным градиентом магнитной индукции \vec{B} , которая в данном опыте достаточно велика и направлена вдоль оси Z .

На пролетающие в зазоре магнита атомы вдоль направления магнитного поля действует сила

$$F_z = p_z^M \cdot \frac{\partial B}{\partial z},$$

обусловленная градиентом индукции неоднородного магнитного поля и зависящая от значения проекции магнитного момента атома на направление поля. Эта сила отклоняет движущийся атом в направлении оси Z , причём за время пролёта магнита движущийся атом отклоняется тем больше, чем больше сила F_Z .

С позиций классической физики магнитный момент атомов вещества вследствие их хаотического теплового движения при влёте в магнитное поле может иметь любое направление в пространстве. В результате пролетевшие через магнит атомы серебра должны были образовать сплошную широкую зеркальную полосу на стеклянной пластинке.

В эксперименте была получена серия узких дискретных зеркальных полосок из напылённых атомов, что объясняется квантовой теорией о наличии пространственного квантования магнитных моментов атома.

Однако в этом же эксперименте был получен и результат, находящийся в противоречии с квантовой теорией.

Из квантовой теории следует, что вследствие симметрии электронного облака механический и магнитный моменты атома, находящегося в основном состоянии, равны нулю и для таких атомов на стеклянной подложке в опыте Штерна-Герлаха должна быть в центре одна узкая полоска. На самом деле поток расщепился на два пучка, которые напылили две узкие полоски, сдвинутые симметрично вверх и вниз. Измерение этих сдвигов позволило определить магнитный момент невозбуждённого атома серебра. Его проекция на ось Z оказалась равной $+\mu_B$ и $-\mu_B$.

Противоречие с квантовой теорией наблюдалось и при изучении тонкой структуры оптических спектров щелочных металлов. Линии оказались двойными. Расщепление спектральных линий очевидно связано с расщеплением самих энергетических уровней, что никак не следует из решения уравнения Шрёдингера.

В экспериментах с ферромагнетиками было обнаружено аномальное значение гиромагнитного отношения, отличающееся от ожидаемого значения в два раза.

В 1925 г. Гаудсмит и Уленбек выдвинули гипотезу о наличии у электрона собственного магнитного момента, названного спином (от англ. spin – кружение, верчение).

Первоначально предполагалось, что спин обусловлен вращением электрона вокруг своей оси, подобно вращению Земли вокруг земной оси при движении по околосолнечной орбите.

Однако такая модель вращающегося заряженного шарика оказалась несостоятельной. Расчёт показал, что ни при каких допустимых скоростях меньших скорости света нельзя вращением электрона индуцировать магнитный момент, равный по величине магнетону Бора. Гиромагнитное

отношение для вращающегося электрона оказалось в 2 раза меньше, чем то, что было получено в опытах.

Спин электрона не имеет классического аналога. Он характеризует внутреннее свойство квантовой частицы, связанное с наличием у неё дополнительной степени свободы. Это количественная характеристика и для электрона она равна $s = 1/2$ (такая же важная как масса m_e и заряд $-e$).

Спином обладают и некоторые другие частицы. У протона и нейтрона $s = 1/2$, а у фотона $s = 1$.

По аналогии с орбитальными моментами можно определить значения собственных механического и магнитного моментов электрона

$$\begin{aligned} L = \hbar \sqrt{l(l+1)} & \Rightarrow L_s = \hbar \sqrt{s(s+1)} = \frac{\sqrt{3}}{2} \hbar \\ p^M = \mu_B \sqrt{l(l+1)} & \Rightarrow p_s^M = 2\mu_B \sqrt{s(s+1)} = \sqrt{3}\mu_B \end{aligned}$$

Гиромагнитное соотношение

$$\Gamma_o = \frac{p^M}{L} = \frac{e}{2m_e} \Rightarrow \Gamma_s = \frac{p_s^M}{L_s} = \frac{2\mu_B}{\hbar} = \frac{e}{m_e} = 2\Gamma_o$$

Проекция собственных моментов на выделенное направление Z определяется спиновым квантовым числом $m_s = \pm s = \pm \frac{1}{2}$.

При этом

$$\begin{aligned} L_{SZ} &= m_s \cdot \hbar = \pm \frac{\hbar}{2} \\ p_{SZ}^M &= 2m_s \cdot \mu_B = \pm \mu_B \end{aligned}$$

Из полученных соотношений следует, что значение спинового момента электрона постоянно, а с дополнительной степенью свободы электрона связана Z-проекция этого момента, которая определяется спиновым квантовым числом m_s и принимает два значения. О таких двух квантовых состояниях обычно говорят как о состояниях со спином, направленным вверх ($m_s = +\frac{1}{2}$) или вниз ($m_s = -\frac{1}{2}$). Поэтому, определяя квантовое состояние электрона в любой системе, следует указать также и ориентацию спина.

Таким образом квантовое состояние электрона в атоме следует определять набором из **четырёх квантовых чисел**

Квантовое число	Символ	Возможные значения
Главное	n	1, 2, 3, ...
Орбитальное	l	0, 1, 2, 3, ... ($n-1$)
Магнитное	m	$-l, \dots, -1, 0, +1, \dots, +l$
Спиновое	m_s	$-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$

При этом каждому значению главного квантового числа n соответствует

$$2\sum(2l+1) = 2n^2$$

возможных комбинаций других квантовых чисел.

Кроме четырёх основных квантовых чисел существуют и другие квантовые числа. Например, квантовое число j , определяющее результирующий момент импульса атома водорода, обусловленный сложением орбитального и собственного моментов электрона.

Как и для любого момента импульса в квантовой системе, результирующий момент определяется из выражения

$$L_j = \hbar \sqrt{j(j+1)},$$

в котором квантовое число j может иметь значения

$$j = l + s = l + \frac{1}{2} \quad \text{и} \quad j = |l - s| = \left| l - \frac{1}{2} \right|$$

Если $l = 0$, то $j = \frac{1}{2}$ имеет только одно значение. При l отличном от нуля возможны два значения $j = l + \frac{1}{2}$ и $j = l - \frac{1}{2}$, которые соответствуют двум различным ориентациям спинового момента относительно орбитального.

Для квантового числа полного момента импульса атома также выполняется **правило отбора**

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

С механическими моментами связаны магнитные моменты, которые взаимодействуют друг с другом подобно тому, как взаимодействуют два замкнутых тока. Это взаимодействие называется **спин-орбитальным**. Оно изменяет полную энергию атома, и, следовательно, в квантовых состояниях с различными квантовыми числами j атом должен обладать различными энергиями. Это приводит к расщеплению линий в оптическом спектре атома.

Атом во внешнем магнитном поле

В сложном многоэлектронном атоме каждый из N электронов обладает орбитальным и спиновым механическим и магнитным моментами. При сложении моментов отдельных электронов в результирующий момент атома возможны два случая:

1). Орбитальный и спиновый моменты каждого электрона складываются в суммарный момент. Такой вид связи называется **JJ – связью**. Обычно такая связь наблюдается у тяжёлых атомов.

2). У лёгких и средних атомов чаще встречается **LS –связь**, в которой все орбитальные механические моменты отдельных электронов складываются в орбитальный момент

$$\mathcal{L}_L = \hbar \sqrt{L(L+1)}, \text{ где}$$

$L = 0; 1; 2; 3; \dots$ - квантовое число суммарного орбитального момента атома.

Спиновые моменты импульса всех электронов атома складываются в суммарный спиновый момент

$$\mathcal{L}_S = \hbar \sqrt{S(S+1)}, \text{ где}$$

S – квантовое число суммарного спинового момента атома.

Если число электронов N – чётное, то $S = 0; 1; 2; \dots; \frac{N}{2}$.

Если число электронов N – нечётное, то $S = \frac{1}{2}; \frac{3}{2}; \frac{5}{2}; \dots; \frac{N}{2}$.

Все возможные значения результирующего механического момента атома определяются по формуле

$$\mathcal{E}_J = \hbar \sqrt{J(J+1)}, \quad \text{где}$$

J – квантовое число результирующего механического момента атома.

$$J = (L + S), \quad (L + S - 1), \quad \dots, |L - S|$$

Проекция результирующего механического момента атома на выделенное направление Z определяется по формуле

$$\mathcal{E}_{JZ} = m_J \hbar, \quad \text{где}$$

квантовое число m_J принимает $(2J + 1)$ значений из ряда

$$m_J = -J, \quad (-J + 1), \quad \dots, \quad (J - 1), \quad +J$$

Результирующий магнитный момент атома рассчитывается по формуле

$$P_J^M = g \cdot \mu_B \sqrt{J(J+1)}, \quad \text{где}$$

$$g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \quad - \text{ **фактор Ланде** , который может иметь}$$

значения даже равным нулю , т.е. у многоэлектронного атома магнитный момент может быть равным нулю, даже если механический момент отличен от нуля.

$g = 1$, если результирующий спин $S = 0$ и

$g = 2$, если квантовое число $L = 0$.

Проекция результирующего магнитного момента атома на выделенное направление Z внешнего магнитного поля

$$P_{JZ}^M = g \cdot \mu_B \cdot m_J$$

Квантовая теория обосновывает **правила отбора** для квантовых чисел L , S и J при переходах атома из одного квантового состояния в другое. Обычно имеют место только такие переходы, в которых

$$\Delta L = 0, \pm 1; \quad \Delta S = 0; \quad \Delta J = 0, \pm 1$$

Эффект Зеемана

При помещении магнитного момента \vec{P}^M во внешнее магнитное поле с индукцией \vec{B} он приобретает дополнительную энергию W за счёт магнитного взаимодействия:

$$W = -\vec{P}^M \cdot \vec{B} = -P_Z^M \cdot B$$

Поэтому, если изолированный атом в состоянии с квантовым числом J попадает в магнитное поле, то энергия его уровня E изменяется так, что это изменение ΔE_J в зависимости от взаимной ориентации магнитного момента и магнитного поля соответствует одному из $(2J + 1)$ возможных значений

$$\Delta E_J = P_{JZ}^M \cdot B = g \cdot \mu_B \cdot m_J \cdot B .$$

В системе излучающих атомов (например, в газе), помещённой в магнитное поле, появятся атомы с различными энергиями исходного уровня.

Следствием этого является расщепление спектральных линий излучения атомов, помещённых в магнитное поле , которое впервые наблюдал Зееман в 1896 г.

Лекция 12

Вынужденное излучение атомов.

Лазеры

Квантовая теория равновесного излучения

Эйнштейн с позиции квантовой теории теоретически рассмотрел проблему равновесного излучения, когда при некоторой температуре T вещество находится в термодинамическом равновесии с излучением, занимающим объём некоторой полости.

Будем считать вещество состоящим из одинаковых не взаимодействующих друг с другом атомов, которые могут находиться только в двух квантовых состояниях:

E_1 – основное состояние атома;

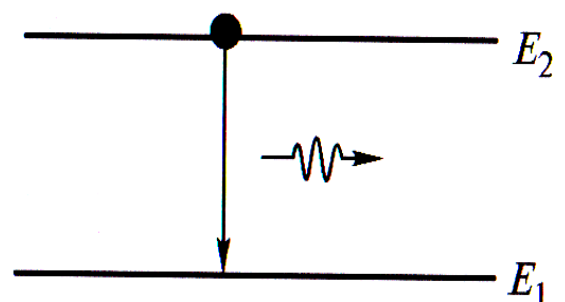
E_2 – возбуждённое состояние атома ($E_2 > E_1$).

Причём возбуждение происходит только при поглощении атомами излучения с частотой ω

$$\hbar\omega = E_2 - E_1$$

В рассматриваемой модели излучение в полости будет монохроматичным и именно такой частоты. Объёмную плотность энергии этого излучения в полости обозначим как $u_{\omega,T}$, считая температуру системы заданной и равной T .

Атом в возбуждённом состоянии может находиться в течении очень малого промежутка времени ($\sim 10^{-8}$ с) и переходит в



основное состояние даже при отсутствии внешнего воздействия, испустив квант энергии $\hbar\omega$.

Такое самопроизвольное, не обусловленное внешними причинами, излучение возбуждённого атома называется **спонтанным излучением**.

Будем считать, что

N_1 – число атомов в рассматриваемой системе находящихся в основном состоянии;

N_2 – число возбуждённых атомов;

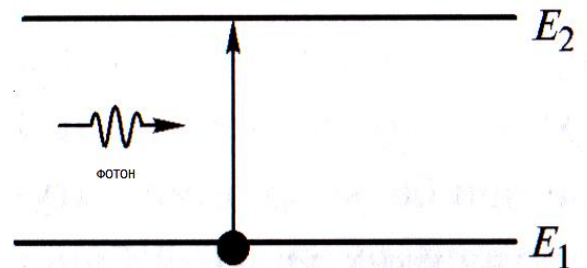
$N = N_1 + N_2$ – общее число атомов.

Вероятность спонтанного излучения в теории Эйнштейна определяется значением некоторого коэффициента A , такого, что в рассматриваемой системе в единицу времени будет наблюдаться $Z_{21} = A \cdot N_2$ спонтанных переходов атомов из возбуждённого состояния в основное. Величину Z_{21} можно назвать скоростью таких переходов, которые увеличивают энергию излучения за счёт уменьшения энергии вещества.

Спонтанное излучение неполяризовано и имеет очень малое время когерентности. Такое излучение испускают обычные источники света (Солнце, нагретые тела и т.д.).

Невозбуждённый атом, поглощая излучение, может перейти в возбуждённое состояние. Вероятность такого процесса определяется значением коэффициента B_{12} .

Скорость перехода атомов из основного в возбуждённое состояние



$$Z_{12} = B_{12} \cdot N_1 \cdot u_{\omega, T}.$$

При равновесии системы вещество – излучение должно выполняться условие

$$Z_{12} = Z_{21} \quad \Rightarrow \quad B_{12} \cdot N_1 \cdot u_{\omega, T} = A \cdot N_2$$

Соотношение между N_1 и N_2 в состоянии термодинамического излучения соответствует распределению Больцмана

$$\frac{N_2}{N_1} = \exp \left[- \frac{(E_2 - E_1)}{kT} \right].$$

Тогда

$$u_{\omega, T} = \frac{A}{B_{12}} \frac{N_2}{N_1} = \frac{A}{B_{12}} \cdot \exp \left[- \frac{(E_2 - E_1)}{kT} \right].$$

Опыт показывает, что $u_{\omega, T}$ при $T \rightarrow \infty$ неограниченно растёт, а теория, согласно данной формуле приводит к тому, что

$$(u_{\omega,T})_{T \rightarrow \infty} = \frac{A}{B_{12}}.$$

Эйнштейн пришёл к выводу, что в рассматриваемой равновесной системе происходит ещё один процесс – **вынужденное излучение**.

Вероятность процесса вынужденного излучения характеризуется коэффициентом B_{21} . Скорость такого процесса определяется как

$$Z_{21} = B_{21} N_2 u_{\omega,T}.$$

Теперь условие равновесия системы

$$Z_{12} = Z_{21} + Z_{21} \quad \text{или} \\ B_{12} N_1 u_{\omega,T} = A N_2 + B_{21} N_2 u_{\omega,T}$$

Теперь и левая и правая часть равенства содержат множитель $u_{\omega,T}$, неограниченно растущий при $T \rightarrow \infty$.

Кроме того, при $\frac{N_2}{N_1} = \exp\left[-\frac{(E_2 - E_1)}{kT}\right]$ и $T \rightarrow \infty$ с учётом $N_2 \rightarrow N_1$ получаем (т.к. $u_{\omega,T} \rightarrow \infty$)

$$B_{12} = B_{21} = B.$$

Таким образом, в теории остаются два коэффициента A и B , характеризующие вероятности рассматриваемых в системе процессов взаимодействия излучения и вещества.

Между этими коэффициентами есть связь, которая получается из формулы Планка $u_{\omega,T} = \frac{\hbar \omega^3}{\pi^2 c^3} \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar \omega}{kT} - 1\right)}$ и выражается формулой

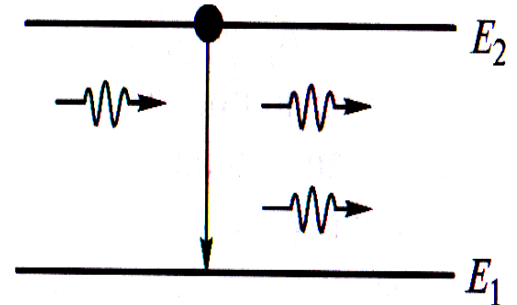
$$B = \frac{\pi^2 c^3}{\hbar \omega^3} A.$$

Свойства вынужденного излучения

1). Вынужденное излучение распространяется строго в том же направлении, что и излучение, его вызвавшее.

2). Фаза волны вынужденного излучения, испускаемого атомом, точно совпадает с фазой падающей волны.

3). Вынужденное излучение линейно поляризовано, с той же плоскостью поляризации, что и падающее излучение.



Т.о. вынужденное излучение при распространении в веществе отличается от спонтанного излучения ничтожно малой расходимостью пучка, а также когерентностью и линейной поляризацией волны.

Среды с инверсной заселённостью энергетических уровней

В соответствии с законом Бугера

$$I_{(x)} = I_0 \exp(-\mu x), \quad \text{где}$$

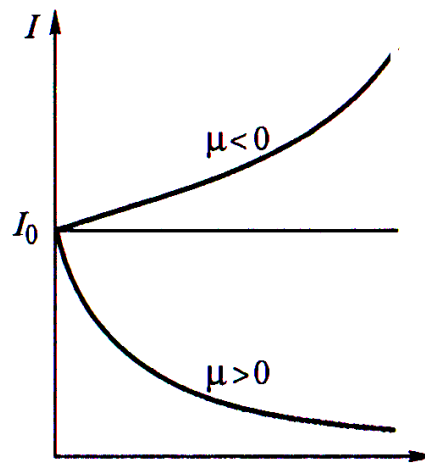
$I_{(x)}$ – интенсивность излучения в веществе на глубине $x > 0$;

I_0 – интенсивность излучения на входе в слой вещества;

μ – коэффициент поглощения вещества.

Для сред, поглощающих излучение, коэффициент μ положителен, но существует возможность создавать среды, усиливающие вынужденное излучение, т.е. с отрицательным коэффициентом μ .

Такие среды должны иметь **инверсную заселённость энергетических уровней**, т.е. число атомов в возбуждённом состоянии в среде превышает число атомов в основном состоянии. На пути фотонов в этом случае чаще встречаются возбуждённые атомы, чем атомы в основном состоянии. Поэтому индуцированное излучение фотонов происходит **чаще** чем их поглощение.



При прохождении света нужной частоты через вещество с инверсной заселённостью уровней поток света не ослабляется, а усиливается.

В обычном равновесном состоянии вещества всегда $N_1 > N_2$. Такое состояние вещества называется состоянием с нормальной заселённостью энергетических уровней.

Для создания активной среды с инверсной заселённостью энергетических уровней необходимы специальные условия, обеспечивающие дополнительную генерацию возбуждённых атомов.

Квантовые генераторы

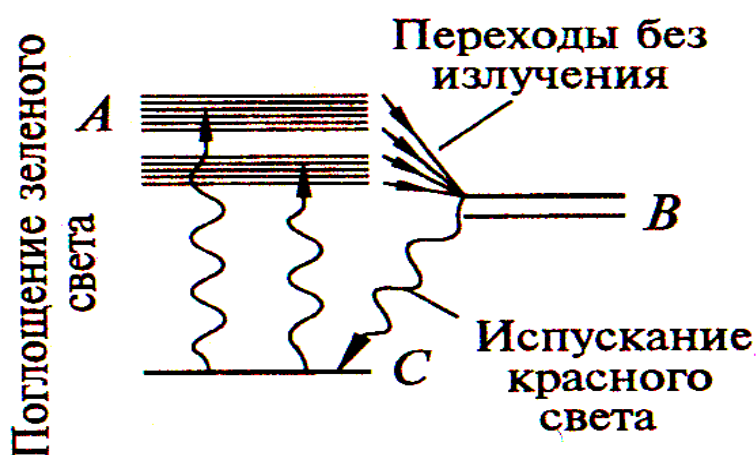
В первом приборе квантовой электроники – молекулярном генераторе активной средой являлся пучок молекул аммиака NH_3 , из которого с помощью сложного квадрупольного конденсатора выводились молекулы с меньшей энергией, а обогащённый возбуждёнными молекулами пучок представлял собой активную среду. В объёмном резонаторе, взаимодействуя с молекулярным пучком, вынужденное излучение частотой $\nu = 24840 \text{ МГц}$ усиливалось.

Молекулярные квантовые генераторы такого типа, работающие в СВЧ диапазоне, получили название **мазеров**. Они применяются в радиолокаторах, радиотелескопах, линиях космической связи, в устройствах для измерения частоты колебаний и промежутков времени с высокой точностью.

В 1960 г. был создан оптический квантовый генератор, получивший название **лазер**.

Обычно в возбуждённом состоянии атомы находятся лишь $10^{-9} - 10^{-7} \text{ с}$. Однако некоторые атомы имеют возбуждённые состояния, в которых они могут находиться довольно длительное время, например, 10^{-3} с . Такие состояния называются метастабильными.

Процесс перевода среды в инверсное состояние, необходимое для работы ОКГ, называется накачкой усиливающей среды. Практически накачка осуществляется по трёхуровневой схеме. В первом лазере, работающем по трёхуровневой схеме был генератор с рубиновым кристаллом в качестве усиливающей среды (Al_2O_3 с примесью Cr_2O_3). Активным веществом служили ионы Cr^{3+} .



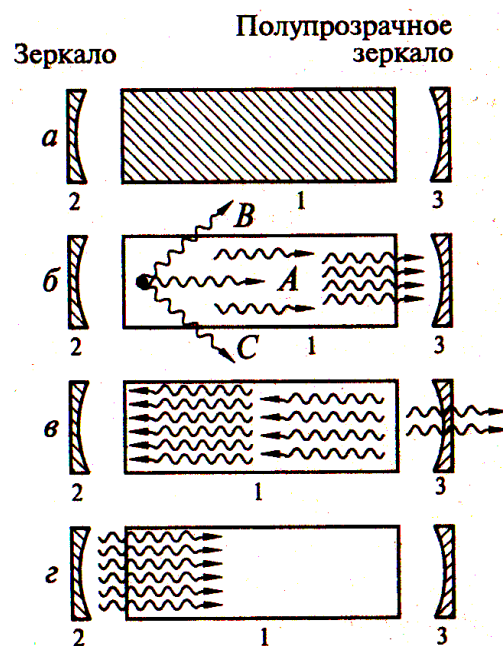
Ближайшими к основному уровню C в Cr^{3+} являются две широкие энергетические зоны A и двойной метастабильный уровень B .

Интенсивное облучение рубина зелёным светом мощной импульсной лампы накачки, наполненной неоном и криптоном переводит ионы хрома на уровни зоны A , откуда происходят безизлучательные переходы на уровни B . Избыток энергии передаётся кристаллической решётке рубина. В результате создаётся инверсная заселённость ионами хрома уровней B и оптический квантовый генератор работает на двух линиях красного света $\lambda = 692,7 \text{ нм}$ и $\lambda = 694,3 \text{ нм}$, соответствующих переходу ионов хрома с уровней B на уровень C .

Лавинообразное нарастание интенсивности в активной среде означает, что такая среда действует как усилитель электромагнитных волн.

Эффект усиления света в ОКГ увеличивается при **многократном** прохождении света через один и тот же слой усиливающей среды.

Фотон, движущийся параллельно оси активной среды **1**, рождает лавину фотонов, летящих в том же направлении. Часть этой лавины (~8%) пройдёт через полупрозрачное зеркало **3** наружу, а часть (92%) отразится и будет нарастать в активной среде. Часть лавины фотонов, дошедших до сплошного зеркала **2**, поглотится в нём, но после отражения от зеркала **2** усиленный поток фотонов будет двигаться так же, как и первоначальный затравочный фотон. Многократно усиленный поток фотонов, вышедший из ОКГ сквозь полупрозрачное зеркало **3**, создаёт пучок света большой интенсивности, остро направленный, с малым расхождением.



Опыт показывает, что генерация света возникает только при определённой длине резонатора (расстоянии между зеркалами) кратному целому числу полуволен

$$L = k \frac{\lambda}{2}.$$

В этом случае на выходе лазера происходит сложение амплитуд световых волн, т.е. в резонаторе образуется стоячая волна.

Мощность светового излучения импульсного лазера (время высвечивания $10^{-8} - 10^{-10} \text{ с}$) может быть более 10^9 Вт т.е. превышать мощность крупной электростанции.

ВОПРОСЫ К РУБЕЖНОМУ КОНТРОЛЮ

1. Законы теплового излучения:

- 1.1 Кирхгофа;**
- 1.2 Вина;**
- 1.3 Стефана-Больцмана.**

2. Квантовые свойства излучения:

- 2.1 Гипотеза Планка;**
- 2.2 Формула Планка;**
- 2.3 Вывод законов Вина и Стефана-Больцмана из формулы Планка;**
- 2.4 Фотозффект (законы Столетова и уравнение Эйнштейна);**
- 2.5 Эффект Комптона;**
- 2.6 Корпускулярно-волновой дуализм света.**

3. Волновые свойства микрочастиц:

- 3.1 Гипотеза де Бройля;**
- 3.2 Дифракция микрочастиц;**
- 3.3 Принцип неопределённости Гейзенберга;**
- 3.4 Задание состояния микрочастицы комплексной пси-функцией;**
- 3.5 Плоская волна де Бройля и её свойства (преломление, интерференция, дифракция);**
- 3.6 Статистический смусл пси-функции и условия, которым она должна удовлетворять;**
- 3.7 Принцип суперпозиции квантовых состояний;**
- 3.8 Уравнение Шрёдингера;**
 - 3.8.1 Общее;**
 - 3.8.2 Стационарное.**

4. Стационарные задачи квантовой механики:

- 4.1 Частица в одномерной пот. яме с бесконечно высокими стенками;**
- 4.2 Частица в трехмерной потенциальной яме... Понятие о вырожденных энергетических уровнях;**
- 4.3 Одномерный потенциальный порог и барьер. Туннельный эффект.**
- 4.4 Сканирующий туннельный микроскоп.**
- 4.5 Гармонический квантовый осциллятор.**

5. Представление физических величин операторами:

- 5.1 Операторы физических величин;**
- 5.2 Гамильтониан;**
- 5.3 Основные постулаты квантовой механики;**
- 5.4 Вероятностный характер результатов измерений в квантовой механике.**

5.5 Вычисление средних значений физических величин в квантовых системах.

6. Ядерная модель атома:

6.1 Постулаты Н.Бора;

6.2 Стационарное уравнение Шрёдингера для атома водорода;

6.3 Волновые функции и квантовые числа;

6.4 Правила отбора квантовых чисел;

6.5 Спектр атома водорода (серия Лаймана, серия Бальмера);

6.6 Ширина спектральных линий.

7.1 Механический и магнитный моменты атома. Опыт Штерна и Герлаха.

7.2 Орбитальный, спиновый и полный угловые моменты. Спин-орбитальное взаимодействие.

7.3 Атом во внешнем магнитном поле. Эффект Зеемана.

8. Спонтанное и индуцированное излучение. Коэффициенты «А» и «В» Эйнштейна. Активные среды с инверсной заселённостью энергетических уровней.

ОКГ. Особенности лазерного излучения. Основные типы лазеров и их применение.

Лекция 13

Квантовые системы из одинаковых частиц

Квантовые особенности поведения микрочастиц, отличающие их от свойств макроскопических объектов, проявляются не только при рассмотрении движения одной частицы, но и при анализе поведения системы микрочастиц. Наиболее отчётливо это видно на примере физических систем, состоящих из одинаковых частиц, – систем электронов, протонов, нейтронов и т.д.

Для системы из N частиц с массами $m_{01}, m_{02}, \dots, m_{0i}, \dots, m_{0N}$, имеющих координаты (x_i, y_i, z_i) , волновая функция может быть представлена в виде

$$\Psi(x_1, y_1, z_1, \dots, x_i, y_i, z_i, \dots, x_N, y_N, z_N, t).$$

Для элементарного объёма

$$dV_i = dx_i \cdot dy_i \cdot dz_i$$

величина

$$w = |\Psi(x_1, y_1, z_1, \dots, x_i, y_i, z_i, \dots, x_N, y_N, z_N, t)|^2 dV_1 \cdot \dots \cdot dV_i \cdot \dots \cdot dV_N$$

определяет вероятность того, что одна частица находится в объёме dV_1 , другая в объёме dV_2 и т.д.

Таким образом, зная волновую функцию системы частиц, можно найти вероятность любой пространственной конфигурации системы микрочастиц, а также вероятность любой механической величины как у системы в целом, так и у отдельной частицы, а также вычислить среднее значение механической величины.

Волновую функцию системы частиц находят из уравнения Шрёдингера

$$\hat{H}\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}, \quad \text{где}$$

\hat{H} – оператор функции Гамильтона для системы частиц

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left[-\frac{\hbar^2}{2m_{0i}} \nabla_i^2 + U_i(x_i, y_i, z_i, t) \right] + \sum_{i \neq j=1}^N U_{ij}(x_i, y_i, z_i, x_j, y_j, z_j).$$

Здесь

$$\nabla_i^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2}$$

$U_i(x_i, y_i, z_i, t)$ – силовая функция для i -ой частицы во внешнем поле, а

$U_{ij}(x_i, y_j, z_i, x_j, y_j, z_j)$ – энергия взаимодействия i -ой и j -ой частиц.

Неразличимость тождественных частиц в квантовой механике

Частицы, обладающие одинаковыми массой, электрическим зарядом, спином и т.д. будут вести себя в одинаковых условиях совершенно одинаковым образом.

Гамильтониан такой системы частиц с одинаковыми массами m_{oi} и одинаковыми силовыми функциями U_i можно записать в виде, представленном выше.

Если в системе поменять i -ую и j -ую частицы, то в силу тождественности одинаковых частиц состояние системы не должно изменяться. Неизменной останется полная энергия системы, а также все физические величины, характеризующие её состояние.

Принцип тождественности одинаковых частиц: в системе одинаковых частиц реализуются лишь такие состояния, которые не меняются при перестановке частиц местами.

Симметричные и антисимметричные состояния

Введём оператор перестановки частиц в рассматриваемой системе - \hat{P}_{ij} . Действие этого оператора заключается в том, что он переставляет местами i -ую и j -ую частицы системы.

Принцип тождественности одинаковых частиц в квантовой механике приводит к тому, что все возможные состояния системы, образованной одинаковыми частицами, делятся на два типа:

симметричные, для которых

$$\hat{P}_{ij} \Psi_S(x_1 y_1 z_1, \dots, x_N y_N z_N, t) = \Psi_S(x_1 y_1 z_1, \dots, x_N y_N z_N, t) \quad \text{и}$$

антисимметричные, для которых

$$\hat{P}_{ij} \Psi_S(x_1 y_1 z_1, \dots, x_N y_N z_N, t) = -\Psi_S(x_1 y_1 z_1, \dots, x_N y_N z_N, t)$$

Если волновая функция, описывающая состояние системы, в какой либо момент времени является симметричной (антисимметричной), то этот тип симметрии сохраняется и в любой другой момент времени.

Бозоны и фермионы

Частицы, состояния которых описываются симметричными волновыми функциями, называются **бозонами**. Системы, состоящие из таких частиц, подчиняются **статистике Бозе – Эйнштейна**. К бозонам относятся фотоны, π - и κ -мезоны, фононы в твёрдом теле, экситоны в полупроводниках и диэлектриках. **Все бозоны обладают нулевым или целочисленным спином.**

Частицы, состояния которых описываются антисимметричными волновыми функциями, называются **фермионами**. Системы, состоящие из таких частиц, подчиняются **статистике Ферми – Дирака**. К фермионам относятся электроны, протоны, нейтроны, нейтрино и **все элементарные частицы и античастицы с полуцелым спином.**

Связь между спином частицы и типом статистики остаётся справедливой и в случае сложных частиц, состоящих из элементарных. Если суммарный спин сложной частицы равен целому числу или нулю, то эта частица является бозоном, а если он равен полуцелому числу, то частица является фермионом.

Пример: α -частица (${}^4_2\text{He}$) состоит из двух протонов и двух нейтронов т.е. четырёх фермионов со спинами $+\frac{1}{2}$. Следовательно спин ядра ${}^4_2\text{He}$ равен 2 и это ядро является бозоном.

Ядро лёгкого изотопа ${}^3_2\text{He}$ состоит из двух протонов и одного нейтрона (три фермиона). Спин этого ядра $1\frac{1}{2}$. Следовательно ядро ${}^3_2\text{He}$ – фермион.

Принцип Паули (запрет Паули)

В системе тождественных фермионов не может быть двух частиц, находящихся в одном и том же квантовом состоянии.

Что же касается системы, состоящей из бозонов, то принцип симметрии волновых функций не накладывает каких либо ограничений на состояния системы. В одном и том же состоянии может находиться **любое число тождественных бозонов.**

Периодическая система элементов

На первый взгляд представляется, что в атоме все электроны должны заполнить уровень с наименьшей возможной энергией. Опыт же показывает, что это не так.

В соответствии с принципом Паули, в атоме **не может быть электронов с одинаковыми значениями всех четырёх квантовых чисел.**

Каждому значению главного квантового числа n соответствует $2n^2$ состояний, отличающихся друг от друга значениями квантовых чисел l , m и m_s .

Совокупность электронов атома с одинаковыми значения квантового числа n образует так называемую оболочку. В соответствии с номером n

Значение n	1	2	3	4	5
Оболочка	K	L	M	N	O
Число возможных состояний	2	8	18	32	50

Оболочки подразделяются на подоболочки, отличающиеся квантовым числом l . Число состояний в подоболочке равно $2(2l + 1)$.

Различные состояния в подоболочке отличаются значениями квантовых чисел m и m_s .

Оболочка	K			L						M				
Подоболочка	1s	2s		2p		3s		3p				3d		
m	0	0	+1	0	-1	0	+1	0	-1	+2	+1	0	-1	-2
m_s	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$
Число электронов	2	2		6		2		6				10		

Понимание периодической системы элементов основано на идее об оболочечной структуре электронного облака атома.

Каждый следующий атом получается из предыдущего добавлением заряда ядра на единицу (e) и добавлением одного электрона, который помещают в разрешённое принципом Паули состояние с наименьшей энергией.

Лекция 14

Квантовые статистические распределения

Особенности поведения частиц, связанные с неразличимостью тождественных частиц в квантовой механике, проявляются и в статистических свойствах систем, состоящих из одинаковых частиц. Это приводит к тому, что статистические распределения частиц в квантовой механике отличаются от статистических распределений, известных из классической физики. Кроме того, статистические свойства бозонов и

фермионов в силу кардинального отличия в поведении этих частиц также оказываются различными.

В классической физике распределение частиц по энергиям описывается хорошо известными из курса молекулярной физики распределением Максвелла

$$dN_M = A_M \cdot e^{-\frac{K}{kT}} dp_x \cdot dp_y \cdot dp_z \quad \text{и}$$

распределением Больцмана

$$dN_B = A_B \cdot e^{-\frac{U}{kT}} dx \cdot dy \cdot dz, \quad \text{где}$$

A_M и A_B – нормировочные константы;

K и U – кинетическая и потенциальная энергия частиц.

В классической физике при выводе распределений считается, что одинаковые частицы принципиально различимы.

Проиллюстрируем различие в распределении классических и квантовых частиц на следующем примере. Пусть нужно распределить две частицы по трём состояниям (ячейкам). Классические частицы будем отмечать номерами **1** и **2**, а квантовые в силу тождественности одинаковыми кружками.

Классические частицы	Бозоны	Фермионы									
<table><tr><td>1</td><td>2</td><td></td></tr></table>	1	2		<table><tr><td>2</td><td>1</td><td></td></tr></table>	2	1		<table><tr><td>•</td><td>•</td><td></td></tr></table>	•	•	
1	2										
2	1										
•	•										
<table><tr><td></td><td>1</td><td>2</td></tr></table>		1	2	<table><tr><td></td><td>2</td><td>1</td></tr></table>		2	1	<table><tr><td></td><td>•</td><td>•</td></tr></table>		•	•
	1	2									
	2	1									
	•	•									
<table><tr><td>1</td><td></td><td>2</td></tr></table>	1		2	<table><tr><td>2</td><td></td><td>1</td></tr></table>	2		1	<table><tr><td>•</td><td></td><td>•</td></tr></table>	•		•
1		2									
2		1									
•		•									
<table><tr><td>12</td><td></td><td></td></tr></table>	12			<table><tr><td>••</td><td></td><td></td></tr></table>	••						
12											
••											
<table><tr><td></td><td>12</td><td></td></tr></table>		12		<table><tr><td></td><td>••</td><td></td></tr></table>		••					
	12										
	••										
<table><tr><td></td><td></td><td>12</td></tr></table>			12	<table><tr><td></td><td></td><td>••</td></tr></table>			••				
		12									
		••									

Фермионы в соответствии с принципом Паули могут находиться в каждой ячейке только поодиночке. Для бозонов никаких ограничений на распределение их по ячейкам не накладывается.

Для классических частиц число возможных распределений равно девяти (вероятность каждого распределения – $1/9$). Для бозе–частиц получается шесть распределений (вероятность – $1/6$). Для ферми–частиц реализуется только три распределения с вероятностью выпадения каждого из них, равной $1/3$.

Распределение Бозе – Эйнштейна

Идеальный газ из бозонов (бозе–газ) – описывается квантовой статистикой Бозе –Эйнштейна.

Распределение Бозе–Эйнштейна – закон, выражающий распределение частиц по энергетическим состояниям в бозе–газе: **при статистическом равновесии и отсутствии взаимодействия среднее число частиц в i -ом состоянии с энергией E_i при температуре системы T равно**

$$\langle N_i \rangle_{\text{Б-Э}} = \frac{1}{\exp\left(\frac{E_i - \mu}{kT}\right) - 1}, \quad \text{где}$$

k – постоянная Больцмана,

T – термодинамическая температура,

μ – **химический потенциал** – термодинамическая функция состояния, определяющая изменение внутренней энергии системы.

Одним из условий термодинамического равновесия системы является равенство химического потенциала для всех частей системы.

Для систем бозонов с постоянным числом частиц химический потенциал может принимать только отрицательные значения ($\mu < 0$).

Величину $\langle N_i \rangle$ называют также числом заполнения энергетического уровня с энергией E_i (далее будем для краткости писать просто E).

Из анализа распределения Б – Э следует, что число бозонов, находящихся на одном энергетическом уровне (в одном состоянии), ничем не ограничено и при малых значениях параметра $\left(\frac{E - \mu}{kT}\right)$ может оказаться очень большим, а при $E = 0$ в системе бозонов может происходить бозе – конденсация, с которой связаны такие явления, как сверхпроводимость и сверхтекучесть.

Рассмотрим случай малых чисел заполнения (будем считать $\langle N_i \rangle_{\text{Б-Э}} \ll 1$). Это условие выполняется при $\exp\left(\frac{E - \mu}{kT}\right) \gg 1$ или при $\left(\frac{E - \mu}{kT}\right) \gg 1$. Тогда можно записать

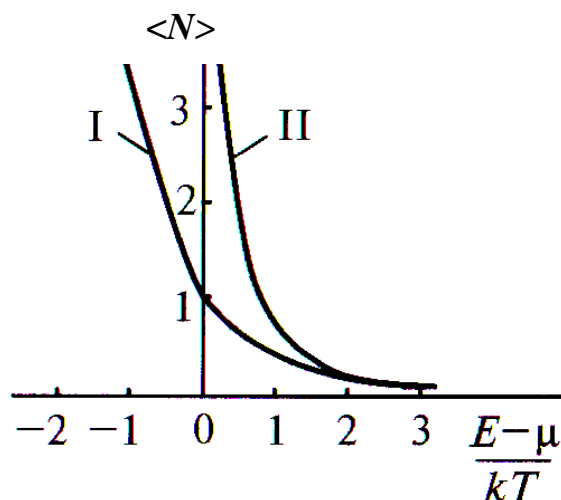
$$\langle N_i \rangle_{\text{Б-Э}} \approx \exp\left(-\frac{E - \mu}{kT}\right) = A \cdot e^{-\frac{E}{kT}}, \quad \text{где} \quad A = \exp\left(\frac{\mu}{kT}\right).$$

Отсюда следует, что при малых числах заполнения, или, как говорят, в случае разреженного газа бозонов распределения Б – Э переходит в классическое распределение Максвелла – Больцмана.

I – статистическое распределение Максвелла – Больцмана;

II – статистическое распределение Бозе – Эйнштейна

Газ, свойства которого в силу тождественности частиц в квантовой механике отличаются от свойств классического идеального газа, называется **вырожденным газом**.



Газ бозонов является вырожденным. Только в случае, когда $\langle N \rangle_{B-E} \ll 1$, вырождение снимается и разреженный бозе-газ ведёт себя подобно классическому газу.

Обычные газы, атомы которых являются бозонами, при нормальных температурах и давлениях не являются вырожденными и подчиняются классической статистике. Вырождение для них наступает либо при очень низких температурах, либо при очень высоких давлениях, т.е. тогда, когда эти газы перестают быть идеальными.

С помощью распределения Бозе–Эйнштейна описываются свойства теплового излучения, теплоёмкость кристаллов и многие другие физические явления.

Для систем бозонов с **переменным числом частиц** химический потенциал равен нулю ($\mu = 0$). Распределение Бозе–Эйнштейна для систем с переменным числом частиц принимает вид

$$\langle N_i \rangle_{B-E} = \frac{1}{\exp\left(\frac{E}{kT}\right) - 1}.$$

Пример: пользуясь распределением Б – Э можно получить формулу Планка для равновесного излучения.

Рассмотрим излучение, находящееся внутри замкнутой полости, стенки которой нагреты до комнатной температуры T . Это излучение представляет собой идеальный газ фотонов, т.е. систему бозонов с переменным числом частиц, распределение по энергиям которых с учётом того, что $E = \hbar\omega$ описывается выражением

$$\langle N_\phi \rangle = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1}$$

Плотность квантовых состояний $g(E)$, т.е. число состояний приходящихся на единичный энергетический интервал, для фотонов описывается выражением

$$g_{\phi}(E) = \frac{V}{\pi^2 c^3 \hbar^3} E^2, \quad \text{где}$$

V – объём полости; c – скорость света в вакууме; E/c – импульс фотонов

(по аналогии с плотностью квантовых состояний $g_{\ominus}(E) = \frac{\sqrt{2} \cdot m_e^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} V \sqrt{E}$ для нерелятивистских электронов с импульсом $p = \sqrt{2m_e \cdot E}$)

Энергия излучения в узком энергетическом интервале от E до $(E+dE)$ складывается из энергий отдельных фотонов и равна

$$\langle N_{\phi} \rangle \cdot g_{\phi}(E) \cdot E \cdot dE$$

В частотном интервале, соответствующему данному энергетическому интервалу

$$\text{от } \omega = \frac{E}{\hbar} \quad \text{до } (\omega + d\omega) = \left(\frac{E}{\hbar} + \frac{dE}{\hbar} \right)$$

можно получить выражение для той же самой энергии с помощью объёмной спектральной плотности энергии излучения $u_{\omega,T}$, представляющей собой энергию излучения в одиночном частотном интервале, отнесённую к единице объёма

$$u_{\omega,T} \cdot V \cdot d\omega = \langle N_{\phi} \rangle \cdot g_{\phi}(E) \cdot E \cdot dE.$$

Тогда, заменив dE на $\hbar d\omega$ и E на $\hbar \cdot \omega$ получим

$$u_{\omega,T} = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1} \cdot \frac{V \cdot E^2}{\pi^2 c^3 \hbar^3} \cdot E \cdot \frac{\hbar \cdot d\omega}{V \cdot d\omega} = \frac{\hbar \omega^3}{\pi^2 c^3} \cdot \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1}.$$

Лекция 15

Распределение Ферми–Дирака

Квантовая статистика Ферми–Дирака описывает идеальный газ из фермионов – ферми-газ.

Распределение Ферми–Дирака – закон, выражающий распределение частиц по энергетическим состояниям в ферми-газе:

при статистическом равновесии и отсутствии взаимодействия среднее число частиц в i -ом состоянии с энергией E_i при температуре T равно:

$$\langle N_i \rangle_{\Phi-D} = \frac{1}{\exp\left(\frac{E_i - \mu}{kT}\right) + 1}.$$

Из этой формулы следует, что $\langle N_i \rangle_{\Phi-D}$ не может быть больше единицы. Это означает, что в одном квантовом состоянии не может находиться более одной ферми-частицы, что согласуется с принципом Паули

Химический потенциал для фермионов может быть только положительным ($\mu > 0$). Иначе при $T \rightarrow 0$ числа заполнения стали бы равными нулю, чего естественно быть не может.

Для случая малых чисел заполнения ($\langle N_i \rangle_{\Phi-D} \ll 1$) получаем

$$\exp\left(\frac{E - \mu}{kT}\right) \gg 1 \quad \text{и} \quad \frac{E - \mu}{kT} \gg 1$$

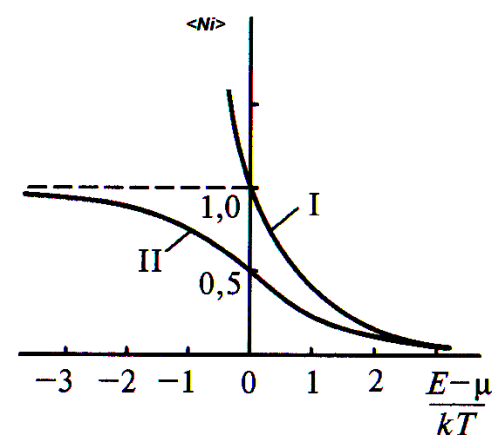
Тогда (пренебрегая единицей в знаменателе) получаем

$$\langle N_i \rangle_{\Phi-D} \approx \exp\left(-\frac{E - \mu}{kT}\right) = A \cdot \exp\left(-\frac{E}{kT}\right), \quad \text{где} \quad A = \exp\left(\frac{\mu}{kT}\right)$$

Распределение Ферми–Дирака при малых числах заполнения (*разреженный газ фермионов*) переходит в классическое распределение Максвелла–Больцмана.

I – статистическое распределение Максвелла–Больцмана;

II – статистическое распределение Ферми–Дирака.



Можно сделать вывод, что **разреженные квантовые газы** (и в случае бозонов, и в случае фермионов) не являются вырожденными и подчиняются классической статистике.

Хотя квантовая статистика в данном случае приводит к тем же результатам, что и классическая, квантовая природа частиц газа остаётся неизменной.

Кардинальное различие между статистическими распределениями Максвелла–Больцмана и Ферми–Дирака наблюдаются при $\frac{E - \mu}{kT} < 1$.

Классические частицы могут накапливаться в одном и том же состоянии в большом количестве. Для них $\langle N_i \rangle$ тем больше, чем меньше их энергия E . Что же касается фермионов, то максимальное их число в одном квантовом состоянии не может превышать единицу, что согласуется с принципом Паули.

Химический потенциал μ имеет размерность энергии и в случае фермионов его называют **энергией Ферми** или **уровнем Ферми** и обозначают E_F . При этом распределение Ферми–Дирака принимает вид

$$\langle N_i \rangle_{\text{Ф-Д}} = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right) + 1}.$$

Энергия Ферми является медленно меняющейся функцией температуры T .

Подставляя в это выражение $T = 0$ (говоря о $T = 0$, подразумевают, что температура может быть сколь угодно близка к абсолютному нулю, т.е. $T \rightarrow 0$) получаем

$$\langle N_i \rangle_{\text{Ф-Д}} = 1 \quad \text{при} \quad E < E_F(0)$$

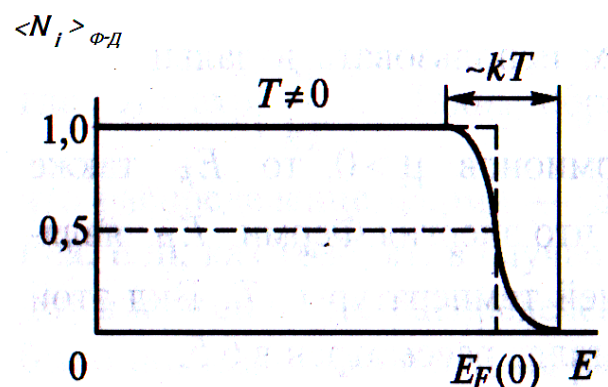
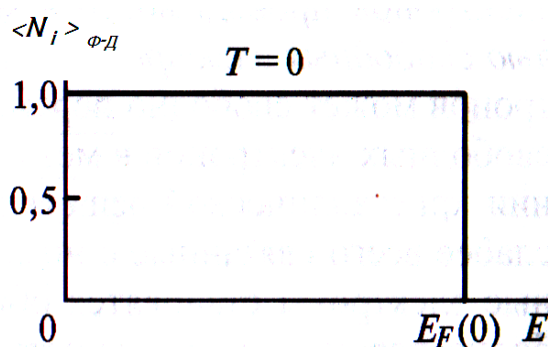
$$\langle N_i \rangle_{\text{Ф-Д}} = 0 \quad \text{при} \quad E > E_F(0)$$

Здесь $E_F(0)$ – значение энергии Ферми при $T = 0$.

Полученные результаты показывают, что все квантовые состояния с энергиями $E < E_F(0)$ оказываются занятыми фермионами, а все состояния с энергиями $E > E_F(0)$ – свободными.

Физический смысл энергии Ферми заключается в том, что при $T \rightarrow 0$ энергия Ферми $E_F(0)$ является максимальной энергией, которой могут обладать фермионы.

Ниже приведены графики зависимости $\langle N_i \rangle$ от E при $T = 0$ (слева) и при $T \neq 0$ (справа)



При $T = 0$ распределение Ферми–Дирака представляет собой ступенчатую функцию единичной высоты, обрывающуюся при $E = E_F(0)$.

При температуре отличной от нуля резкий скачок $\langle N_i \rangle_{\Phi-D}$ от единицы до нуля становится более размытым и происходит в области энергий, ширина которой порядка kT

При любой температуре отличной от нуля $\langle N_i \rangle_{\Phi-D} = \frac{1}{2}$ при $E = E_F$.

Наряду с энергией Ферми E_F при анализе поведения ферми-частиц вводится также **импульс Ферми** p_F и **скорость Ферми** v_F , определяемые соотношениями

$$p_F = \sqrt{2m_o E_F} \quad \text{и} \quad v_F = \sqrt{\frac{2E_F}{m_o}}.$$

Это максимальные импульс и скорость, которыми может обладать ферми-частица с массой m_o при температуре $T = 0$.

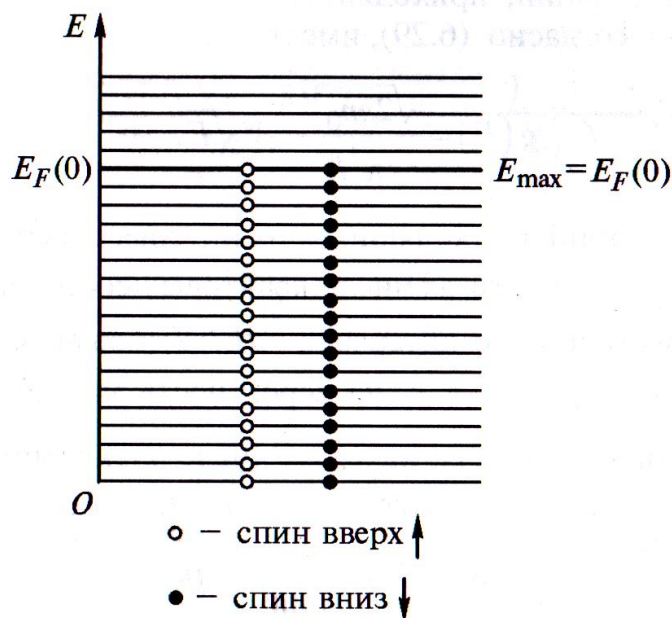
Электронный газ в металлах

Модель свободных электронов в металлах предполагает, что при образовании кристаллической решётки от атомов отщепляются некоторые слабее всего связанные с ними (валентные) электроны. Эти электроны проводимости, обеспечивающие электропроводность металлов, в первом приближении можно рассматривать как идеальный газ свободных электронов, для которых металлический образец является потенциальной ямой.

В случае $T = 0$ электроны располагаются на самых нижних доступных для них энергетических уровнях.

Согласно принципу Паули, на каждом энергетическом уровне будет находиться по два электрона с различной ориентацией спинов $\left(\pm \frac{1}{2}\right)$

Если число электронов в металле равно N , то при $T = 0$ будут заполнены первые $N/2$ уровней с энергией $E \leq E_{\max} = E_F$. Число заполненных и свободных энергетических уровней очень



велико, и они расположены настолько плотно, что энергетический спектр электронов можно считать квазинепрерывным.

Найдём функцию распределения электронов проводимости по энергиям.

Число электронов dN , энергия которых лежит в интервале от E до $E + dE$ равно

$$dN = g(E) \cdot \langle N_i \rangle_{\Phi-D} \cdot dE, \quad \text{где}$$

$$g(E) = \frac{\sqrt{2} \cdot m_e^{\frac{3}{2}}}{\pi^2 \hbar^3} \cdot V \cdot \sqrt{E} \quad - \quad \text{плотность квантовых состояний электронов в металле . т.е. число состояний, приходящихся на единичный энергетический интервал.}$$

Полное число свободных электронов в металле

$$N = \int dN = \int_0^{\infty} g(E) \cdot \langle N_i \rangle_{\Phi-D} dE = V \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{2} \cdot m_e^{\frac{3}{2}}}{\pi^2 \hbar^3} \cdot \sqrt{E} \cdot \frac{1}{\exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right) + 1} dE$$

Концентрация электронов n в металле

$$n = \frac{N}{V} = \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{2} \cdot m_e^{\frac{3}{2}}}{\pi^2 \hbar^3} \cdot \sqrt{E} \cdot \frac{1}{\exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right) + 1} dE.$$

Функция

$$F(E) = \frac{dn}{dE} = \frac{\sqrt{2} m_e^{\frac{3}{2}}}{\pi^2 \hbar^3} \cdot \sqrt{E} \cdot \frac{1}{\exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right) + 1}$$

называется **функцией распределения свободных электронов по энергиям.**

С помощью функции распределения $F(E)$ можно найти среднее значение любой физической величины Q , зависящей от E

$$\langle Q \rangle = \frac{\int_0^{\infty} Q(E) \cdot F(E) \cdot dE}{\int_0^{\infty} F(E) dE} = \frac{1}{n} \int_0^{\infty} Q(E) \cdot F(E) dE$$

При $T = 0$ функция $F(E)$ имеет вид

$$F(E) = \begin{cases} \frac{\sqrt{2}m_e^{\frac{3}{2}}}{\pi^2\hbar^3}\sqrt{E} & \text{при } E < E_F(0) \\ 0 & \text{при } E > E_F(0) \end{cases}$$

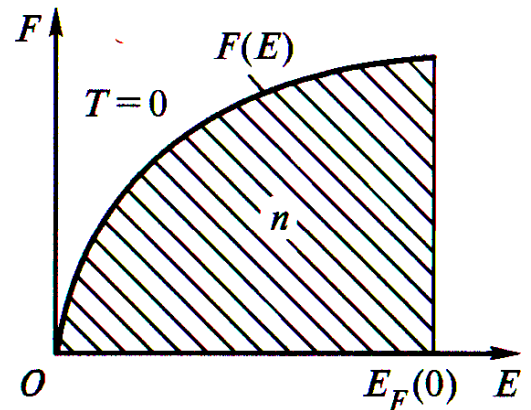
Распределение электронов по энергиям описывается выражением

$$dn = \begin{cases} \frac{\sqrt{2}m_e^{\frac{3}{2}}}{\pi^2\hbar^3}\sqrt{E}dE & \text{при } E < E_F(0) \\ 0 & \text{при } E > E_F(0) \end{cases}$$

Из физического смысла функции распределения следует, что площадь под кривой $F(E)$ численно равна концентрации n свободных электронов в металле.

Верхний предел интегрирования для вычисления n при $T = 0$ нужно брать равным $E_F(0)$. Тогда интегрируя, получаем

$$n = \int_0^{E_F(0)} \frac{\sqrt{2}m_e^{\frac{3}{2}}}{\pi^2\hbar^3} \sqrt{E} dE = \frac{2}{3} \frac{\sqrt{2}m_e^{\frac{3}{2}}}{\pi^2\hbar^3} (E_F(0))^{\frac{3}{2}}.$$



Отсюда находим $E_F(0)$:

$$E_F(0) = \frac{\hbar^2}{2m_e} (3\pi^2 n)^{\frac{2}{3}}$$

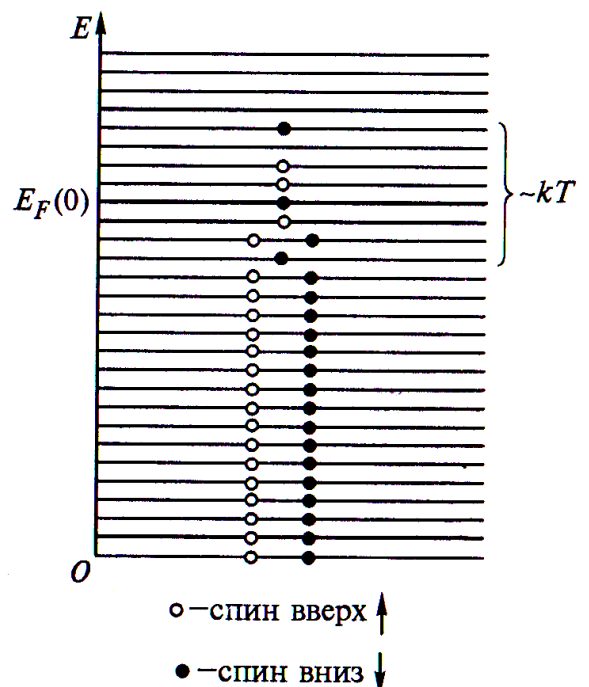
Расчёты показывают, что энергия Ферми электронного газа в металлах составляет **несколько электрон-вольт**.

Наряду с энергией Ферми вводится понятие температуры Ферми T_F , которая определяется следующим образом:

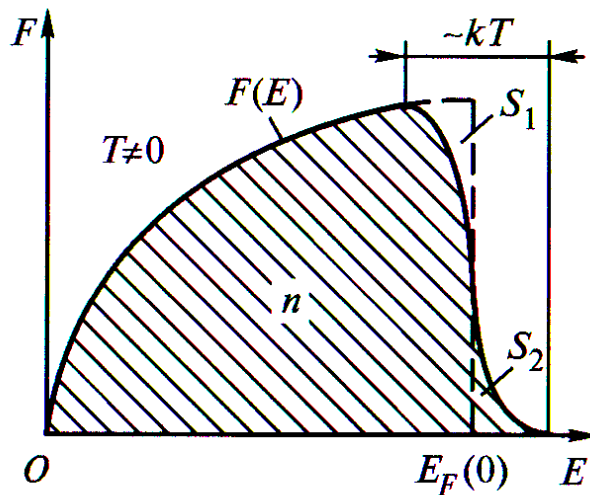
$$kT_F = E_F(0) \quad \Rightarrow \quad T_F = \frac{E_F(0)}{k}.$$

Справа представлено схематическое распределение электронов по энергетическим уровням при $T > 0$

Все состояния, энергия которых меньше энергии Ферми на величину порядка kT , заняты электронами. Все



состояния, энергия которых превосходит энергию Ферми на величину порядка kT , оказываются свободными. В области энергий шириной порядка kT вблизи энергии Ферми имеются уровни, частично заполненные электронами. Только электроны, заполняющие уровни в этой области, могут принимать участие в различных физических процессах в металлах. Только их энергия может изменяться в ходе этих процессов.



Зависимость $F(E)$ при $T > 0$ имеет участки S_1 и S_2 , площади которых одинаковы и определяют число электронов в единице объёма металла, перешедших при нагреве образца с заполненных уровней (S_1) на незаполненные (S_2).

Интеграл

$$n = \int_0^{E=\infty} dn$$

позволяет получить приближённое значение E_F при $E_F \gg kT$.

$$E_F \approx E_F(0) \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{E_F(0)} \right)^2 \right].$$

Условие $E_F \gg kT$ выполняется для всего диапазона температур, при котором металлы существуют в твёрдом виде, а при температуре близкой к комнатной $E_F \approx E_F(0)$.

Вырожденный электронный газ

Вырожденный электронный газ — это газ, свойства которого существенно отличаются от свойств классического идеального газа вследствие неразличимости одинаковых частиц в квантовой механике.

Газ, состоящий из квантовых частиц, оказывается вырожденным тогда, когда среднее расстояние между частицами $\langle a \rangle$ становится меньше или сравнимым с дебройлевской длиной волны частицы λ_B , т.е. $\langle a \rangle \leq \lambda_B$.

Температурой вырождения называется температура, ниже которой проявляются квантовые свойства газа, обусловленные тождественностью его частиц. Для газа, состоящего из фермионов, температурой вырождения является температура Ферми T_F , которая тем больше, чем меньше масса частиц и чем больше их концентрация. Так как масса электрона очень мала

($m_e = 9,1 \cdot 10^{-30}$ кг), а концентрация электронов в металлах достаточно велика ($10^{28} \dots 10^{29} \text{ м}^{-3}$) то $T_F \sim 10^4$ К.

Следовательно, электронный газ в металлах оказывается вырожденным при всех температурах, при которых металл остаётся в твёрдом состоянии.

Лекция 16

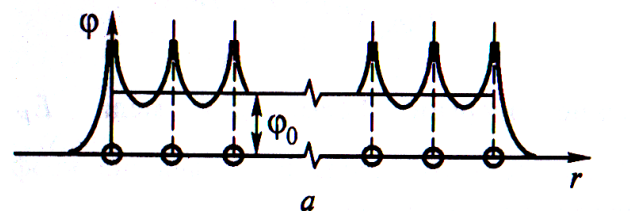
Эмиссия электронов из металла

Эмиссия электронов может возникать при нагреве металлов (термоэлектронная эмиссия), при облучении металлов различными частицами, например фотонами (фотоэлектронная эмиссия), при приложении к металлу сильных электрических полей (автоэлектронная эмиссия) и т.д.

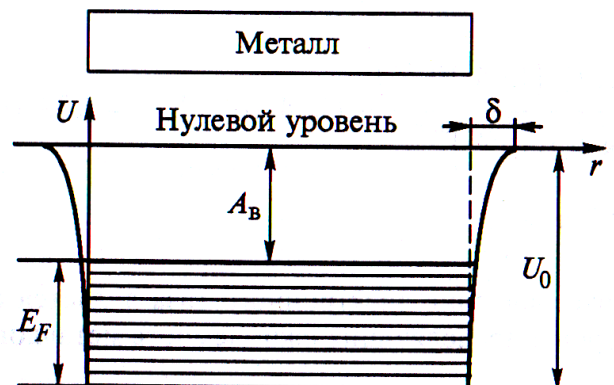
Работа выхода электронов из металла

Известно, что в металле имеются газ свободных электронов и положительно заряженные ионы, расположенные в узлах кристаллической решётки. Эти ионы создают внутри металла электрическое поле, потенциал которого ϕ периодически меняется вдоль прямой, проходящей через узлы решётки. Усредняя этот потенциал, будем считать, что всюду внутри металла он одинаков и равен ϕ_0 .

a – внутренний потенциал ϕ



b – энергетические уровни электронов в металле при $T = 0$



Таким образом, свободный электрон, находящийся в металле, обладает потенциальной энергией $U_0 = -e\phi_0$

При переходе электрона из металла в вакуум его потенциальная энергия U становится равной нулю, т.е. металл является для электрона потенциальной ямой глубиной U_o .

Чтобы извлечь электрон из металла необходимо совершить работу выхода

$$A_e = U_o - E_F, \quad \text{где}$$

E_F – уровень Ферми, определяемый кинетической энергией электронов даже при $T = 0$.

Работа выхода – это наименьшая работа, которую необходимо совершить, чтобы удалить из металла электроны, находящиеся на уровне Ферми.

При $T > 0$ работу выхода определяют так же с помощью соотношения $A_e = U_o - E_F$.

Работа выхода является важной характеристикой поверхности металла и зависит от ее состояния, наличия примесей в поверхностном слое и ряда других факторов.

Для чистого вольфрама $U_o = 13,45$ эВ
 $E_F = 8,95$ эВ
 $A_e = 4,5$ эВ

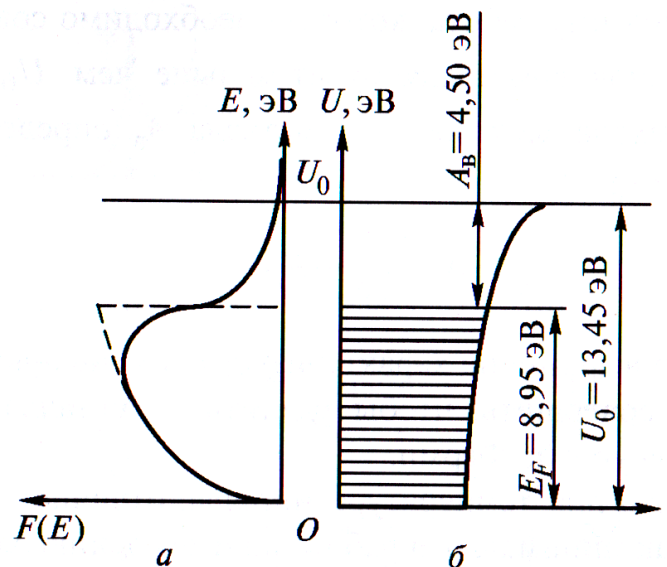
Нанесение на поверхность вольфрама тонкого слоя атомов цезия позволяет снизить работу выхода с 4,50 до 1,36 эВ.

Термоэлектронная эмиссия

При повышении температуры металла кинетическая энергия теплового хаотического движения электронов увеличивается и может стать настолько большой, что некоторые из электронов смогут преодолевать потенциальный барьер U_o на границе металла и выходить наружу.

a – функция распределения $F(E)$
 при $T_1 = 0$ (пунктирная линия)
 и при $T_2 > 0$ (сплошная линия)

б – значения U_o , E_F и A_e для вольфрама



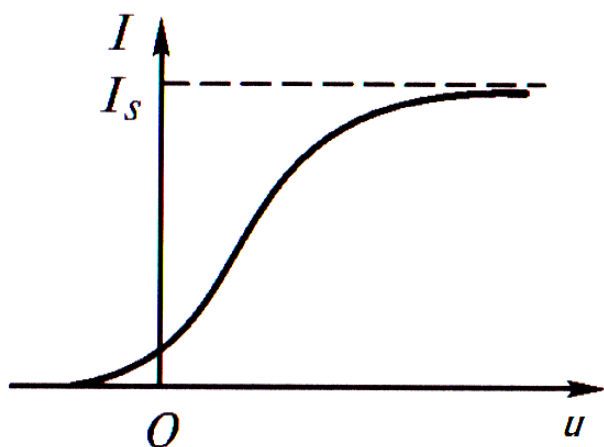
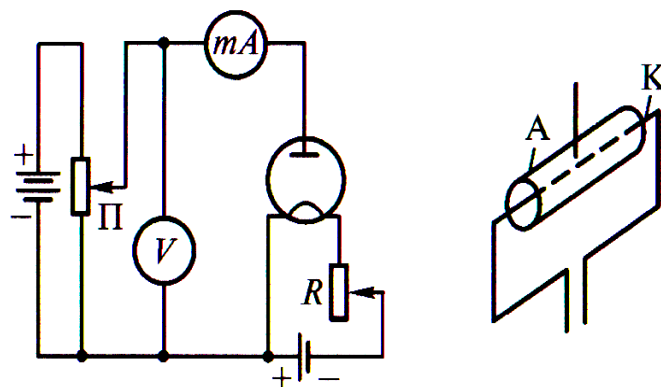
При $T_1 = 0$ свободные электроны не могут покидать вольфрам, поскольку глубина потенциальной ямы $U_o = 13,45$ эВ превышает максимальное значение их кинетической энергии, равное $E_F = 8,95$ эВ. При нагреве металла до температуры $T_2 \sim 1000$ К “хвост” функции распределения $F(E)$ заходит за уровень U_o , т.е. у некоторой части электронов кинетическая энергия превышает глубину потенциальной ямы и они могут покинуть металл. **Испускание электронов нагретыми телами называется термоэлектронной эмиссией.**

Если металл поместить в электрическое поле, напряжённость которого \vec{E} направлена к поверхности металла, то это поле будет отводить вышедшие электроны от металла. В вакууме вблизи поверхности металла будет создаваться направленное движение электронов, т.е. появляется термоэлектронный ток.

Термоэлектронную эмиссию можно наблюдать а помощью вакуумного диода – двухэлектродной лампы.

Катод такого диода обычно представляет из себя проволоку, по которой пропускают ток, для нагрева джоулевым теплом.

При холодном катоде электронам не хватает энергии, чтобы покинуть катод и ток через диод не течёт. При нагреве катода до высокой температуры (от 900 до 2900 К для разных типов катодов) электроны выходят с поверхности катода и ускоряются электрическим полем, создавая ток, текущий через диод.



Из типичной ВАХ вакуумного диода следует, что при нагретом катоде ток через диод может протекать даже при отрицательных значениях подаваемого напряжения, то есть наиболее энергичные электроны, покинувшие катод, доходят до анода, несмотря на небольшое тормозящее электрическое поле.

При положительном значении напряжения U между анодом и катодом вылетающие электроны увлекаются электрическим полем, но зависимость создаваемого электрического тока от напряжения не является линейной, т.е. закон Ома не выполняется. Начальный участок ВАХ достаточно хорошо описывается законом «трёх вторых» Ленгмюра

$$I \sim u^{3/2}$$

Такой характер зависимости $I(u)$ обусловлен влиянием на движение электронов в лампе отрицательного пространственного заряда, формируемого электронами, не достигшими анода.

При дальнейшем увеличении u всё большая часть вылетевших с поверхности катода электронов будет увлекаться к аноду. Наконец начиная с некоторого напряжения, все испущенные катодом электроны будут падать на анод. **Термоэлектронный ток в диоде достигает своего максимального значения I_s , называемого током насыщения.**

Плотность тока насыщения j_s характеризует эмиссионные свойства катода – максимальное число электронов, которое может испустить катод с единицы поверхности в единицу времени при данной температуре.

Величину j_s вычисляют по **формуле Ричардсона–Дэшимана**

$$j_s = A \cdot T^2 \exp\left(-\frac{A_B}{kT}\right), \quad \text{где}$$

$A = \frac{4\pi m_e k^2}{(2\pi\hbar)^3} = 1,2 \cdot 10^6 \text{ A}/(\text{м}^2\text{K}^2)$ – универсальная константа (постоянная Ричардсона).

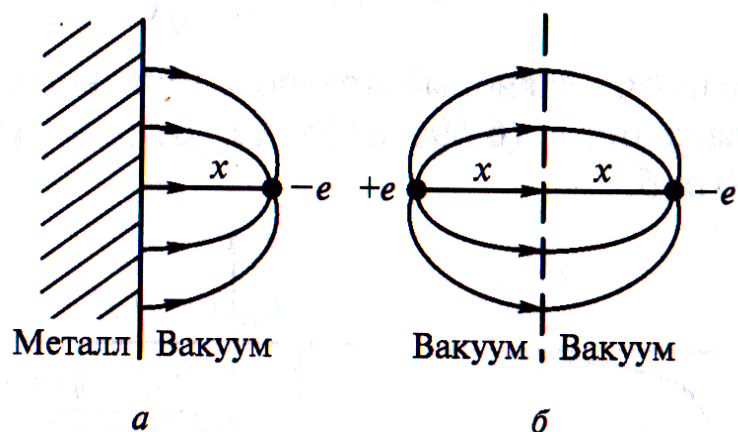
Видно, что j_s очень сильно зависит от A_B и T . Так для вольфрама повышение температуры от 1000 К до 2500 К увеличивает плотность тока эмиссии практически от нуля до $3000 \text{ A}/\text{м}^2$, а покрытие поверхности вольфрама мономолекулярным слоем оксида тория ThO_2 , уменьшающее работу выхода, даёт возможность при $T = 1900 \text{ K}$ получать $j_s = 10\,000 \text{ A}/\text{м}^2$

Эффект Шоттки

Выясним, какие силы действуют на вылетевший из металла термоэлектрон и как они зависят от расстояния x от электрона до поверхности металла. Пусть x значительно превышает период кристаллической решётки, а поверхность металла является плоской и непрерывной.

a – поле системы электрон–металл

б – поле, создаваемое электроном



и его зеркальным изображением

Согласно методу зеркальных изображений, сила, которая действует на электрон со стороны проводящей поверхности, отстоящей от него на расстоянии x , будет такой же, как между зарядами $-e$ и $+e$, расположенными на расстоянии $2x$ друг от друга

$$F_{из} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{(2x)^2} = \frac{e^2}{16\pi\epsilon_0 x^2}.$$

Потенциальная энергия электрона в таком силовом поле

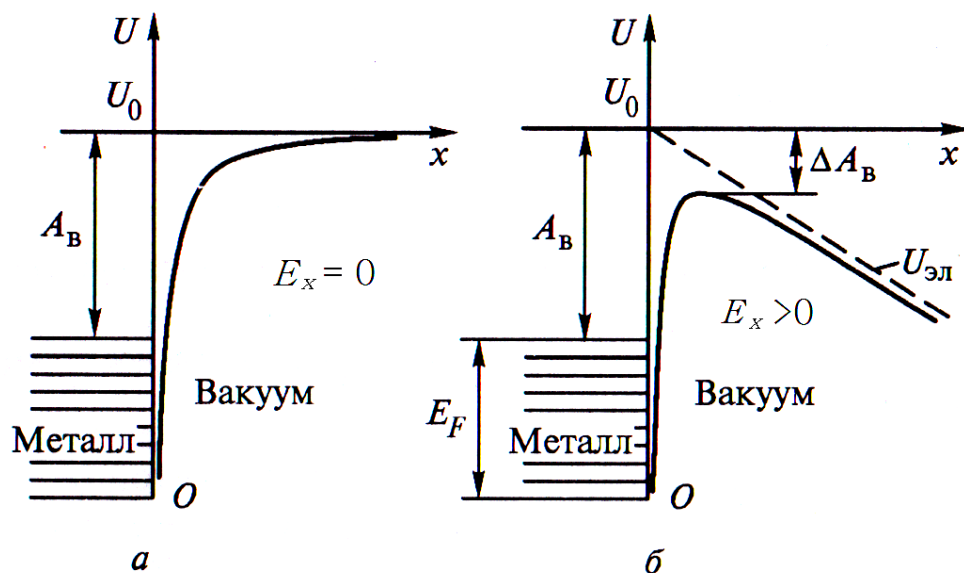
$$U_{из} = -\frac{e^2}{16\pi\epsilon_0 x}.$$

Если к поверхности металла приложить внешнее электрическое поле \vec{E} , способствующее выходу электронов из металла, то потенциальную энергию электрона в электрическом поле можно представить в виде

$$U_{эл} = U_0 - e \cdot |\vec{E}| \cdot x.$$

Суммарную потенциальную энергию электрона, находящегося вблизи поверхности металла, помещённого в электрическое поле, можно представить как

$$U = U_{из} + U_{эл} = U_0 - \frac{e^2}{16\pi\epsilon_0 x} - e \cdot |\vec{E}| \cdot x.$$



Во внешнем электрическом поле работа выхода электрона из металла уменьшается на величину ΔA_B . Это уменьшение приводит к тому, что большее число электронов преодолевает потенциальный барьер на границе металл–вакуум, что ведёт к увеличению силы тока электронной эмиссии (эффект Шоттки).

Расчёты дают выражение

$$\Delta A_B = \sqrt{\frac{e^3 \cdot |\vec{E}|}{4\pi\epsilon_o}}, \text{ а формула Ричардсона–Дэшмана принимает вид}$$

$$j_s = A \cdot T^2 \exp\left(-\frac{A_B - \Delta A_B}{kT}\right) = A \cdot T^2 \exp\left(\frac{1}{kT} \sqrt{\frac{e^3 \cdot |\vec{E}|}{4\pi\epsilon_o}}\right) \cdot \exp\left(-\frac{A_B}{kT}\right).$$

Холодная (автоэлектронная) эмиссия электронов из металлов

Пусть вблизи поверхности металла имеется электрическое поле напряжённостью \vec{E} , способствующее выходу электронов из металла.

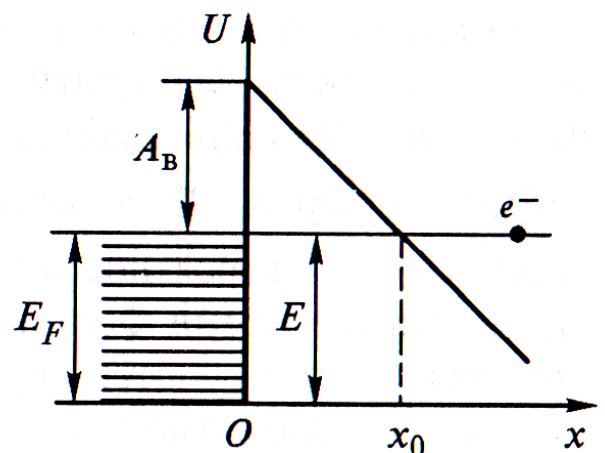
Рассматривая эффект Шоттки, было показано наличие потенциального барьера на границе металл–вакуум. Туннелирование электронов через такой барьер и объясняет явление холодной эмиссии – выход электронов из металла при низких температурах.

Согласно представлениям классической физики, электрон не может преодолеть потенциальный барьер, но в квантовой механике вероятность туннелирования электрона из металла определяется коэффициентом прохождения через потенциальный барьер

$$D = \exp\left\{-\frac{2}{\hbar} \int_0^{x_0} \sqrt{2m_e [U(x) - E]} dx\right\}$$

Для упрощения расчёта рассматривают туннелирование электронов через треугольный потенциальный барьер, где

$$U(x) = U_o - e \cdot |\vec{E}| \cdot x = E_F + A_B - e \cdot |\vec{E}| \cdot x$$



Коэффициент прозрачности такого барьера

$$D = \exp \left[-\frac{2}{\hbar} \int_0^{x_0} \sqrt{2m_e (E_F + A_B - e \cdot |\vec{E}| \cdot x - E)} dx \right],$$

где верхний предел интегрирования определяется из условия $U(x_0) = E$.

Интегрируя, получаем

$$D(E) = \exp \left[-\frac{\sqrt[4]{2m_e}}{3e\hbar} \cdot \frac{(E_F + A_B - E)^{\frac{3}{2}}}{|\vec{E}|} \right].$$

Введём обозначение

$$|\vec{E}_o| = \frac{\sqrt[4]{2m_e}}{3e\hbar} \cdot (A_B + E_F - E)^{\frac{3}{2}},$$

где $|\vec{E}_o|$ имеет смысл напряжённости эффективного электрического поля.

Тогда $D = \exp \left(-\frac{|\vec{E}_o|}{|\vec{E}|} \right)$ и плотность тока холодной

эмиссии

$$j = j_o D = j_o \cdot \exp \left(-\frac{\langle |\vec{E}_o| \rangle}{|\vec{E}|} \right)$$

$\langle |\vec{E}_o| \rangle \sim (10^8 \div 10^9) \text{ В/м}$ – усреднённое по энергиям электронов значение $|\vec{E}_o|$.

Туннелируют через потенциальный барьер в основном электроны, энергия которых близка к энергии Ферми E_F .

Чтобы создать большую напряжённость электрического поля \vec{E} вблизи поверхности металла, автоэлектронные эмиттеры делают в виде поверхностей с малым радиусом кривизны: конуса, иглы, лезвия и т.д.