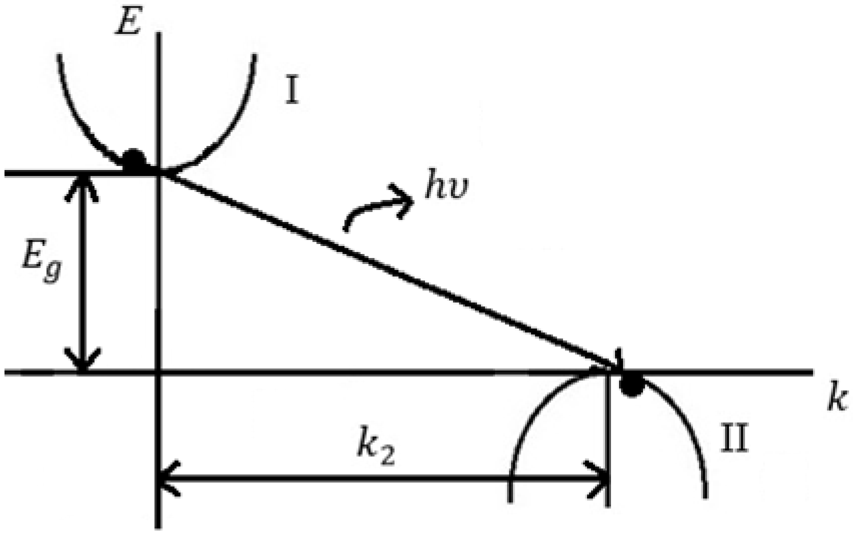
УНИВЕРСИТЕТ ИТМО

Г.Г. Зегря, М.И. Векслер, И.Г. Смирнова, И.А. Устинова

ЗАДАЧИ ПО КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ



Санкт-Петербург
2019

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
УНИВЕРСИТЕТ ИТМО

Г.Г. Зегря, М.И. Векслер, И.Г. Смирнова, И.А. Устинова

ЗАДАЧИ ПО КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ПОСОБИЕ

РЕКОМЕНДОВАНО К ИСПОЛЬЗОВАНИЮ В УНИВЕРСИТЕТЕ ИТМО
по направлениям подготовки 12.03.05 Лазерная техника и лазерные технологии и 16.03.01 Техническая физика
в качестве учебно-методического пособия для реализации образовательных программ высшего образования бакалавриата

УНИВЕРСИТЕТ ИТМО

Санкт-Петербург
2019

Зегря Г.Г., Векслер М.И., Смирнова И.Г., Устинова И.А. Задачи по квантовой механике – СПб: Университет ИТМО, 2019. – 116 с.

Рецензент:
Паршин Д.А., д.ф.-м.н., профессор, профессор, Санкт-Петербургский Политехнический университет им. Петра Великого;

Пособие рекомендовано бакалаврам факультета Лазерной фотоники и оптоэлектроники, обучающимся по направлениям подготовки 12.03.05 «Лазерная техника и лазерные технологии» и 16.03.01 «Техническая физика» для работы на практических занятиях и закрепления лекционного материала курса «Физика твердого тела». Каждый раздел пособия содержит краткую теорию и рекомендации по решению задач. Задачи предполагают широкое использование математического аппарата квантовой механики.

УНИВЕРСИТЕТ ИТМО

Университет ИТМО – ведущий вуз России в области информационных и фотонных технологий, один из немногих российских вузов, получивших в 2009 году статус национального исследовательского университета. С 2013 года Университет ИТМО – участник программы повышения конкурентоспособности российских университетов среди ведущих мировых научно-образовательных центров, известной как проект «5 в 100». Цель Университета ИТМО – становление исследовательского университета мирового уровня, предпринимательского по типу, ориентированного на интернационализацию всех направлений деятельности.

Содержание

1. Корпускулярно-волновой дуализм. Эксперименты, предшествовавшие созданию квантовой механики

Согласно концепции корпускулярно-волнового дуализма, каждому объекту могут быть приписаны как корпускулярные (импульс $\boldsymbol{p}$, энергия E), так и волновые характеристики (волновой вектор $\boldsymbol{k}$, частота ω). Такие характеристики реальны для любого объекта, независимо от того, как он традиционно воспринимается: как волна, частица или квазичастица.

Связь между p и E, с одной стороны, и λ и ω, с другой, дается соотношениями де Бройля:

Характеристики волны	Характеристики частицы	Связь
волновой вектор $\boldsymbol{k}$	импульс $\boldsymbol{p}$	$\boldsymbol{p} = \hbar\boldsymbol{k}$
частота ω	энергия E	$E = \hbar\omega$

где $k = 2\pi/\lambda$, λ – длина волны.

Выражение, связывающее энергию и импульс, может быть заменено на дисперсионное соотношение и наоборот. Так, например, для объектов, обычно называемых «частицами», чаще всего имеет место $E = p^2/2m$, или в «волновой» терминологии – закон дисперсии $\omega = a \cdot k^2$ ($a = \hbar/2m$). Для «волн» (как электромагнитных, так и звуковых) более типично $\omega = v \cdot k$, то есть в корпускулярных обозначениях – $E = \beta \cdot p$ ($\beta = v$), где v – скорость волны. На практике, особенно в твердых телах, могут иметь место и значительно более сложные законы дисперсии – как для световых волн, так и для электронов и квантов упругих колебаний.

Задачи данного раздела требуют непосредственного применения соотношений де Бройля, а также обычных законов сохранения энергии и импульса. Задачи посвящены конкретным физическим эффектам, анализ части из которых послужил предпосылкой к созданию современной квантовой механики. Естественно, для каждого из явлений имеется свой специфический «круг формул», которые приводятся в процессе решения.

Задача 1.1. Импульс света с энергией E падает в виде узкого почти параллельного пучка на зеркало с коэффициентом отражения ρ (рисунок 1).

Угол падения Θ. Определить с помощью корпускулярных представлений импульс $|\boldsymbol{p}_{mir}|$, переданный зеркалу.

Зеркало неподвижно.

$\boldsymbol{p}_{ini}$ – импульс пучка до отражения,

$\boldsymbol{p}_{fin}$ – импульс отраженного пучка,

$\boldsymbol{p}_{mir}$ – импульс, переданный зеркалу.

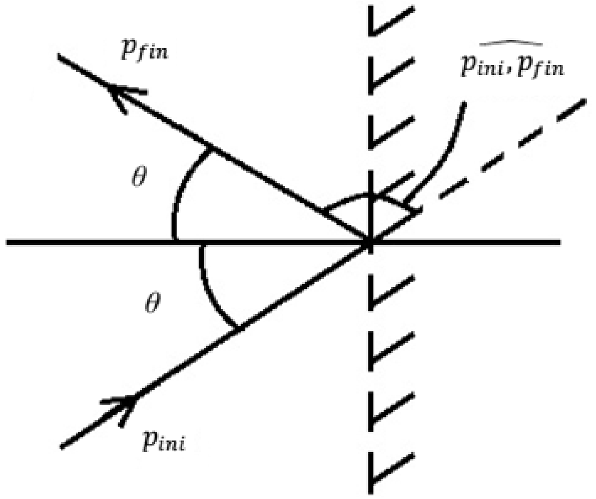


Рисунок 1 – Импульс света, падающий на зеркало

$\boldsymbol{p}_{ini} = \boldsymbol{p}_{fin} + \boldsymbol{p}_{mir}$ (из закона сохранения импульса)
(эффект Комптона здесь не рассматривается) →

$$\boldsymbol{p}_{mir} = \boldsymbol{p}_{ini} - \boldsymbol{p}_{fin}$$

$$|\boldsymbol{p}_{mir}| = \sqrt{\boldsymbol{p}_{ini}{}^2 + \boldsymbol{p}_{fin}{}^2 - 2 \cdot |\boldsymbol{p}_{ini}| \cdot |\boldsymbol{p}_{fin}| \cdot \cos(\boldsymbol{p}_{ini}, \boldsymbol{p}_{fin})} = \cdots$$

$$|\boldsymbol{p}_{ini}| = \frac{E}{c}$$

$$|\boldsymbol{p}_{fin}| = \frac{pE}{c}$$

$$\cos(\boldsymbol{p}_{ini}, \boldsymbol{p}_{fin}) = \cos(\pi - 2\Theta) = -\cos(2\Theta)$$

$$\ldots = \frac{E}{c} \cdot \sqrt{1 + p^2 + 2p\cos(2\Theta)}.$$

Задача 1.2. Лазер излучил в импульсе длительностью τ пучок света с энергией E. Найти среднее давление такого светового импульса, если его сфокусировать в пятно диаметром d на поверхность, перпендикулярную к пучку, с коэффициентом отражения p.

Среднее давление:

$$\langle P \rangle = \frac{\langle F \rangle}{S},$$

$\langle F \rangle$ – средняя сила, действующая на площадку (площадь последней S),

$$\langle F \rangle = \frac{\langle p \rangle}{\tau},$$

где $\langle p \rangle$ – средний импульс, переданный площадке. Его мы обозначаем маленькой буквой p, в отличие от давления P. Из закона сохранения импульса (из корпускулярных представлений):

$$\langle p \rangle = \frac{1}{c} \cdot (1 + p) \cdot E.$$

Если бы отражение отсутствовало, $\langle p \rangle$ равнялось бы просто E/c, поскольку это означало бы передачу импульса от света к площадке. При наличии отражения необходимо учесть еще, что отраженный свет несет импульс, направленный противоположно к импульсу падающий фотонов. Поэтому и переданный пластинке импульс соответственно возрастает.

Получается:

$$\langle P \rangle = \frac{(1+p)\cdot E}{c\tau S} = \left(\text{так как } S = \frac{\pi d^4}{4}\right) = \frac{4E(1+p)}{\pi d^2 c\tau}.$$

Задача 1.3. Пучок электронов неизвестной скорости v падает на диафрагму с узкой прямоугольной щелью ширины b (рисунок 2). Определить скорость этих электронов, если на экране, отстоящем от щели на расстояние l, ширина центрального дифракционного максимума равна Δx.

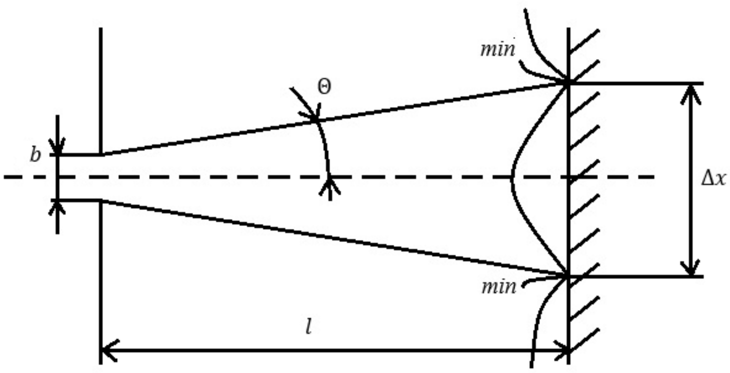


Рисунок 2 – Пучок электронов, падающий на диафрагму с узкой прямоугольной щелью ширины b

$$b = 1\ \mu\text{м},$$
$$\Delta x = 0.36\ \text{мм},$$
$$l = 50\ \text{см}.$$

Если бы в задаче фигурировали фотоны (вместо электронов), то это был бы случай обычной дифракции Фраунгофера на щели, который подробно изучен в оптике.

Центральный дифракционный максимум окружен минимумами, расстояние (по экрану) между которыми и есть Δx.

Условие минимума:

$$b\sin(\Theta) = \lambda.$$

У нас $\Delta x \gg b$, так что можно не конкретизировать, где «вершина» того угла, который обозначен на рисунке Θ.

Из геометрии,

$$\sin(\Theta) \approx -\frac{\Delta x/2}{l}.$$

В случае электронов под «λ» следует понимать дебройлевскую длину волны электрона:

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p}\ (p = mv).$$

Теперь можно найти скорость электронов:

$$b\frac{\Delta x}{2l} = \frac{2\pi\hbar}{mv} \Rightarrow v \Rightarrow \frac{4\pi \cdot \hbar \cdot l}{b \cdot \Delta x \cdot m}.$$

Задача 1.4. Узкий пучок моноэнергетичных электронов падает нормально на поверхность монокристалла. В направлении Θ с нормалью к поверхности наблюдается максимум отражения четвертого порядка при энергии электронов T. Вычислить соответствующее значение межплоскостного расстояния.

В подходе Брэгга-Вульфа считается, что отражение частиц атомными плоскостями происходит «зеркально» (то есть угол падения равен углу отражения). Каждый боковой дифракционный пучок, возникший при дифракции на той или иной атомной плоскости, совпадает по направлению с пучком, зеркально отраженным какой-то другой атомной плоскостью. Направлениями зеркально отраженных лучей исчерпываются все возможные направления на дифракционные максимумы (подробнее см. Д.В. Сивухин «Оптика»).

Поэтому наличие дифракционного максимума (в данной задаче) под углом Θ (не равным нулю) при нормальном падении луча означает, что отражение, соответствующее рассматриваемому максимуму, происходит от атомной плоскости, непараллельной к срезу кристалла, то есть непараллельной к поверхности, «ощущаемой рукой». «Межплоскостное расстояние» – это расстояние «d» по рисунку 3.

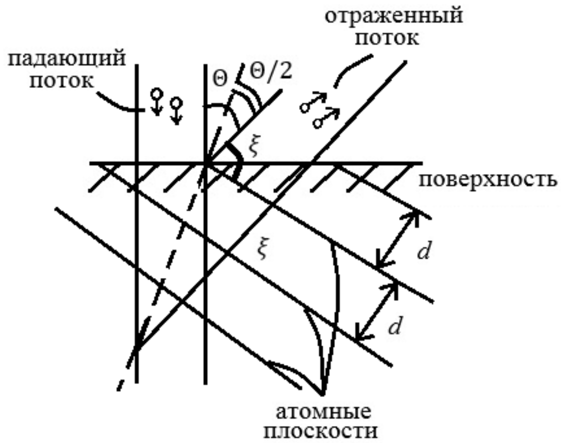


Рисунок 3 – Узкий пучок моноэнергетичных электронов, падающий нормально на поверхность монокристалла

Условие максимума (Брэгг-Вульф):

$$2d\sin(\xi) = n\lambda.$$

Угол ξ обозначен на рисунке; он связан с углом Θ, данным в условии задачи, как

$$\xi = \frac{\pi}{2} - \frac{\Theta}{2},$$

n – порядок максимума, который – по условию – равен 4. Так как $\sin(\xi) = \cos(\Theta/2)$,

$$\frac{n \cdot \lambda}{2} = d \cdot \cos\left(\frac{\Theta}{2}\right).$$

Длина волны (де Бройля) для электрона легко выражается через кинетическую энергию:

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mT}}.$$

Поэтому:

$$d = \frac{nh}{2 \cdot \sqrt{2mT} \cdot \cos\left(\frac{\Theta}{2}\right)} = \frac{\pi n \hbar}{\sqrt{2mT} \cdot \cos\left(\frac{\Theta}{2}\right)}.$$

Задача 1.5. Фотон с импульсом p рассеялся на свободном электроне и стал обладать импульсом p'. Найти угол рассеяния.

Выражение для импульса фотона через его длину волны имеет вид:

$$p = \frac{2\pi\hbar}{\lambda} \Rightarrow \lambda = \frac{2\pi\hbar}{p}$$

(и аналогично для λ').

После рассеяния импульс будет (из эффекта Комптона):

$$p' = \frac{2\pi\hbar}{\lambda'} = \frac{2\pi\hbar}{\lambda + \lambda_c(1 - \cos\Theta)} = \frac{2\pi\hbar}{\frac{2\pi\hbar}{p} + \frac{2\pi\hbar}{mc}(1 - \cos\Theta)}.$$

Отсюда можно найти Θ (полезно использовать, что $\sin^2\frac{\Theta}{2} = \frac{1}{2}(1 - \cos\Theta)$):

$$p' = \frac{pmc}{mc + p \cdot 2 \cdot \sin^2\frac{\Theta}{2}} \Rightarrow \frac{1}{p'} = \frac{1}{p} + \frac{2\sin^2\frac{\Theta}{2}}{mc} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \sin^2\frac{\Theta}{2} = \frac{mc}{2}\left(\frac{1}{p'} - \frac{1}{p}\right) \Rightarrow \sin\frac{\Theta}{2} = \sqrt{\frac{mc}{2} \cdot \frac{p - p'}{pp'}}.$$

Задача 1.6. Фотон, испытав столкновение с релятивистским электроном, рассеялся под углом Θ, а электрон остановился. Найти комптоновское смещение длины волны рассеянного фотона.

Под «$\Delta\lambda$» понимается разность $\lambda' - \lambda$, где λ' и λ– длины волн фотона после и до столкновения, соответственно.

Процесс столкновения подчиняется законам сохранения:

$$\begin{cases} \hbar\omega + E_e = mc^2 + \hbar\omega', \\ \boldsymbol{p} + \boldsymbol{p}' = \boldsymbol{p}_e. \end{cases}$$

Здесь E_e – полная релятивистская энергия летящего электрона, $\boldsymbol{p}_e$ – его импульс. После столкновения импульс электрона равен нулю, а энергия mc^2 (он остановился).

Из законов сохранения следует:

$$\begin{cases} -\hbar\cdot(\omega-\omega')+mc^2=E_e, \\ \boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p}=\boldsymbol{p}_e. \end{cases} \quad (*)$$

Полученный результат идентичен результату, который получается при рассмотрении «обычного» эффекта Комптона (рассеяния на электронах, покоящихся изначально), с той разницей, что штрихованные и нештрихованные величины поменялись местами.

Это означает (см. ниже), что после столкновения длина волны фотона уменьшится на ту же величину, как она увеличивалась при столкновении с покоящимся электроном, то есть:

$$\Delta\lambda=-\lambda\cdot(1-\cos\Theta)=-\frac{4\pi h}{mc}\cdot\sin^2\frac{\Theta}{2}.$$

Последнее можно получить и строго, то есть непосредственно решая систему (*). Возведем обе части обоих уравнений (*) в квадрат:

$$\begin{cases} -\hbar^2\cdot(\omega-\omega')^2+(mc^2)^2-2\hbar mc^2\cdot(\omega-\omega')=E_e, \\ p'^2-p^2-2\boldsymbol{p}'\boldsymbol{p}={p_e}^2. \end{cases}$$

Умножим нижнее уравнение на c^2 и вычтем его из верхнего:

$$\hbar^2\omega^2-2\hbar^2\omega\omega'+\hbar^2{\omega'}^2+(mc^2)^2-2\hbar mc^2\omega+2\hbar mc^2\omega'-{p'}^2c^2-$$
$$-p^2c^2+2\boldsymbol{p}'\boldsymbol{p}c^2={E_e}^2-{p_e}^2\cdot c^2.$$

Ряд членов непосредственно сокращается. Кроме того, мы учтем, что и что ${E_e}^2-{p_e}^2\cdot c^2=(mc^2)^2$ и что $|p|=\hbar\omega/c$. Получается:

$$-\hbar^2\omega\omega'+\hbar mc^2(\omega'-\omega)+\hbar^2\omega\omega'\cos\Theta=0.$$

Но $\omega=2\pi c/\lambda$, $\omega'=2\pi c/\lambda'$, $\hbar=h/2\pi$. Используя это, имеем:

$$-h^2c^2\frac{1}{\lambda\lambda'}+hmc^3\left(\frac{1}{\lambda}-\frac{1}{\lambda'}\right)+h^2c^2\frac{1}{\lambda\lambda'}\cos\Theta=0.$$

Отсюда, после сокращения на $hc^2/\lambda\lambda'$:

$$-h+mc(\lambda-\lambda')+h\cos\Theta=0\Rightarrow$$
$$\Rightarrow\Delta\lambda=\lambda'-\lambda=-\frac{h}{mc}\cdot(1-\cos\Theta)=-\frac{4\pi\hbar}{mc}\sin^2\frac{\Theta}{2}.$$

В этой задаче разобран так называемый «обратный» эффект Комптона (он наблюдался экспериментально, так же, как и «обычный» эффект Комптона).

Задача 1.7. Узкий пучок α–частиц с кинетической энергией T падает нормально на золотую фольгу, содержащую n ядер/см^2. Найти относительное число α-частиц, рассеянных под углом $\Theta<\Theta_0=20^0$.

Относительное число частиц, рассеянных под углом $[\Theta,\Theta+\mathrm{d}\Theta]$:

$$\frac{dN}{N}=n(k\cdot\frac{q_1q_2}{4T})^2\cdot\frac{\sin(\Theta)\cdot d\Theta\cdot 2\pi}{\sin^4\frac{\Theta}{2}}\ (*),$$
$$(d\Omega=\sin(\Theta)d\Theta\cdot d\varphi).$$

Найдем требуемое в задаче число частиц как разность между 1 (всеми частицами) и числом частиц, рассеявшихся на углы более Θ_0 (так делается, чтобы уйти от использования формулы (*) для анализа рассеяния на малые углы – она пригодна именно для больших углов).

$$\frac{dN}{N} = 1 - \int_{\Theta_0}^{\pi} 2\pi n \left(k \cdot \frac{q_1 q_2}{4T}\right)^2 \cdot \frac{2\sin\left(\frac{\Theta}{2}\right)\cos\left(\frac{\Theta}{2}\right) d\Theta}{\sin^4\frac{\Theta}{2}} =$$

$$= 1 - 4\pi\left(k \cdot \frac{q_1 q_2}{4T}\right)^2 n \cdot \int_{\Theta_0}^{\pi} \frac{\cos\left(\frac{\Theta}{2}\right) d\Theta}{\sin^3\frac{\Theta}{2}} = 1 + 4\pi n\left(k \cdot \frac{q_1 q_2}{4T}\right)^2 \frac{1}{\mathrm{tg}^2\frac{\Theta}{2}}\Bigg|_{\Theta_0}^{\pi} =$$

$$= 1 - 4\pi n\left(k \cdot \frac{q_1 q_2}{4T}\right)^2 \cdot \mathrm{tg}^{-2}\frac{\Theta_0}{2}.$$

Примечание: $\int \frac{\cos(ax)}{\sin^3 ax} dx = -\frac{1}{2a \cdot \sin^2 ax} + \mathrm{const}_1 = -\frac{1}{2a \cdot \mathrm{tg}^2 ax} + \mathrm{const}_2$; мы используем здесь выражение через «tg».

Здесь $k = 1/4\pi\varepsilon_0$ (СИ), $q_1 = qZ$ (Z – зарядовое число золота, равное 79, $q_2 = 2q$ – рассеиваются α –частицы (ядра He); q – заряд электрона).

Поэтому результат:

$$\frac{dN}{N} = 1 - \frac{\pi n Z^2 q^4 k^2}{\mathrm{tg}^2\left(\frac{\Theta_0}{2}\right)} \cdot \frac{1}{T^2}.$$

Подробнее о формуле Резерфорда см. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц «Механика» [1].

Задача 1.8. Из формулы Планка получить формулы Рэлея-Джинса и Вина.

Формула Планка:

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

Если $\hbar\omega \ll k_B T$, то

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

пусть $x = \frac{\hbar\omega}{k_B T}$; при $|x| \ll 1$ $\frac{x}{e^x - 1} \approx 1 - \frac{x}{2} + \cdots \approx 1$;

оставляя лишь первый член разложения, имеем:

$$u_\omega \approx \frac{\omega^2 k_B T}{\pi^2 c^3} \text{ (формула Рэлея – Джинса).}$$

Если $\hbar\omega \gg k_B T$, то можно пренебречь «–1» в знаменателе, по сравнению с экспонентой, и

$$u_\omega = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \cdot e^{-\frac{\hbar\omega}{k_B T}} \text{ (формула Вина).}$$

Задача 1.9. Излучение Солнца по своему спектральному составу близко к излучению абсолютно черного тела, для которого максимум излучательной способности приходится на длину волны $\lambda_m = 0.48\mu m$.

Найти массу, теряемую Солнцем ежесекундно за счет излучения. Оценить время, за которое масса Солнца уменьшится на 1%.

Из закона смещения Вина, $T = b/\lambda_m$ – температура короны Солнца.

Будем предполагать, что излучение происходит равномерно со всей поверхности изотермического газового шара, причем, поскольку изменения массы малы, будем считать размеры звезды стабильными. Найдем излученную энергию E_{rad}, а затем – эквивалентную ей массу (из соотношения Эйнштейна).

$$E_{rad} = M_e \cdot S \cdot t = \sigma \cdot \left(\frac{b}{\lambda_m}\right)^4 \cdot 4\pi r_s^2 \cdot t = 4.4 \cdot 10^{26} \quad (\text{Дж} \cdot \text{с}),$$

M_e – светимость единицы площади, b – постоянная Вина, σ – постоянная Стефана-Больцмана, r_s – радиус Солнца (нужно взять его табличное значение), S – площадь поверхности (ее изменением в процессе истечения массы пренебрегаем), t – время (=1с).

Подсчитанное таким способом значение светимости $M_e \cdot S$ оказывается несколько больше стандартного, взятого из справочника для Солнца ($L_s = 3.8 \cdot 10^{26}$ Дж $\cdot$ с).

Теперь вычисляем ежесекундно теряемую массу:

$$Mc^2 = E_{rad} \Rightarrow M = \frac{E_{rad}}{c^2} = 5 \cdot 10^9 \text{ (кг/с)}.$$

Зависимость массы, потерянной Солнцем, от времени есть

$$M = \frac{1}{c^2} \cdot \sigma \cdot \left(\frac{b}{\lambda_m}\right)^4 \cdot 4\pi r_s^2 \cdot t.$$

Из этого соотношения можно найти τ, за которое масса уменьшится на 1%. Положив $M = 0.01 \cdot M_s$ (M_s – масса Солнца), получим, что $\tau \sim 10^{11}$ лет.

Задача 1.10. а) Убедиться в том, что между объемной плотностью энергии излучения u_ω и испускательной способностью m_ω стенок абсолютно черного тела имеет место связь $m_\omega = (c/4) \cdot u_\omega$; б) Вычислить в законе Стефана-Больцмана $M_e = \sigma \cdot T^4$.

а) Из определения,

$$u_\omega = \frac{d\epsilon}{dVd\omega}; \; m_\omega = \frac{d\epsilon}{dSdtd\omega},$$

$d\epsilon$ – энергия излучения с частотой $(\omega, w + d\omega)$, то есть

$d\epsilon = dN_\omega \cdot \hbar\omega$ (dN_ω – число фотонов с энергией $(\hbar\omega, \hbar\omega + \hbar d\omega)$),

dV – элемент объема «сосуда» с излучением,

dS – элемент площади внутренней поверхности этого сосуда.

$$u_\omega = \frac{dN_\omega \cdot \hbar\omega}{dVd\omega} = dn_\omega \cdot \frac{\hbar\omega}{d\omega},$$

dn_ω – «концентрация» фотонов с данной энергией (принимается, что она одна и та же во всем объеме):

$$m_\omega = \frac{dN_\omega \cdot \hbar\omega}{dSdtd\omega}.$$

Теперь рассмотрим такую задачу: пусть имеется сосуд, концентрация частиц в котором $[dn_\omega]$ (о природе этих частиц забываем). Спрашивается – сколько частиц (dz) ударяется о площадку (dS) на стенке сосуда за время dt (рисунок 4)? Эта задача решена в статфизике (см. И.Е. Иродов, 2.108).

$$\frac{dZ}{dSdt} = \int_{\Theta=0}^{\Theta=\pi/2}\int_{v=0}^{\infty} d\big([dn_\omega](v)\big)\cdot\frac{d\Omega}{4\pi}\cdot v\cos(\Theta) = \cdots$$

$$\ldots = \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\Theta\cdot\frac{2\pi}{4\pi}\cdot[dn_\omega]\cdot c\cdot\sin(\Theta)\cos(\Theta) = [dn_\omega]\cdot\frac{c}{4}.$$

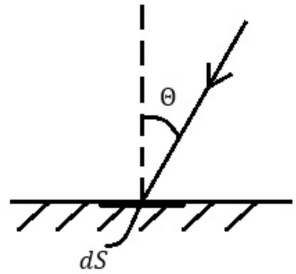


Рисунок 4 – Стенка сосуда, концентрация частиц в котором $[dn_\omega]$

$d\big([dn_\omega](v)\big)$ определяется конкретным законом распределения частиц по скоростям. (В статфизике чаще всего это закон распределения Максвелла, а вместо $[dn_\omega]$ писалось «$f_{Maxwell}$»). Поскольку фотоны имеют скорость «c»,

$$d\big([dn_\omega](v)\big) = [dn_\omega]\cdot\delta(v-c)\cdot dv,$$

(δ–дельта-функция: $\int_0^\infty v\cdot\delta(v-c)\cdot dv = 0$)

Элемент телесного угла:

$$d\Omega = 2\pi\cdot\sin(\Theta)\cdot d\Theta.$$

Но число частиц, «ударившихся» об единичную площадку за единицу времени – это, применительно к задаче о фотонах, – число поглощенных этой площадкой фотонов (оно же – число испущенных, так как имеет место равновесие), откуда:

$$\frac{dZ}{dSdt} = \frac{dN_\omega}{dSdt}.$$

Получается, что

$$m_\omega = \frac{dN_\omega}{dSdt}\cdot\frac{\hbar\omega}{d\omega} = [dn_\omega]\cdot\frac{c}{4}\cdot\frac{\hbar\omega}{d\omega} = \frac{c}{4}\cdot u_\omega,$$

что и требовалось.

б) $M_e = \int_0^\infty m_\omega\cdot d\omega = \frac{c}{4}\cdot\int_0^\infty \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2c^3}\cdot\frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_BT}}-1} = (x = \hbar\omega/k_BT) =$

$$= \frac{ck_B^4T^4}{4\pi^2c^3\hbar^3}\cdot\int_0^\infty\frac{x^3}{e^x-1}dx = \frac{\pi^2k_B^4T^4}{60c^2\hbar^3}\ \text{(использовано, что значение последнего интеграла } \pi^4/15\text{)},$$

поэтому $\sigma = \frac{\pi^2 k_B^4}{60c^2\hbar^3}$.

Задача 1.11. Найти уравнение адиабатического процесса (в переменных V, T), проводимого с тепловым излучением, имея в виду, что между давлением и плотностью энергии теплового излучения существует связь: $P = u/3$.

Второе начало термодинамики гласит:

$$0 = dQ = dU - d\Lambda \quad (*),$$

dQ равно нулю, поскольку процесс адиабатический.

$$d\Lambda = -\mathrm{PdV} = -\frac{u}{3}dV.$$

Так как $u = \frac{4}{c}\sigma T^4$,

$$d\Lambda = -\frac{4}{3c}\sigma T^4 dV,$$

$$dU = Vdu + udV = V\frac{16}{c}\sigma T^3 dT + \frac{4}{c}\sigma T^4 dV.$$

Из (*) получается:

$$0 = V\frac{16}{c}\sigma T^3 dT + \frac{4}{c}\sigma T^4 dV + \frac{4}{3c}\sigma T^4 dV,$$

откуда

$$3VdT = -TdV,$$

то есть

$$\frac{dT}{T} = -\frac{dV}{3V}.$$

Решение этого дифференциального уравнения:

$$lnT = -\frac{1}{3}lnV + \mathrm{const}$$

или $lnT = \ln(\Lambda V)^{-\frac{1}{3}} \Rightarrow T = \Lambda V^{-1/3}$ (Λ – произвольная константа).
Получилось, что уравнение адиабатического процесса имеет вид:

$$T^3 V = \mathrm{const}.$$

Задача 1.12. Найти температуру полностью ионизованной водородной плазмы плотностью p, при которой давление теплового излучения равно газокинетическому давлению частиц плазмы. Давление теплового излучения $P = u/3$, где u – объемная плотность энергии; вещество подчиняется уравнению состояния идеальных газов.

Давление излучения:

$$P_{rad} = \frac{u}{3} = \frac{4M_e}{3c} = \frac{4\sigma T^4}{3c},$$

σ – постоянная Стефана-Больцмана, M_e – энергетическая светимость.

Газокинетическое давление находится из уравнения состояния:

$$P_{gas}V = \frac{m}{M}RT \Rightarrow P_{gas} = \frac{pRT}{M},$$

R – универсальная газовая постоянная, $p = M/V$ – плотность, M – молярная масса атомарного (а не молекулярного) водорода, так как плазма полностью ионизована.

$$P_{rad} = P_{gas} \Rightarrow \frac{4\sigma T^4}{3c} = \frac{pRT}{M} \Rightarrow T = \sqrt[3]{\frac{3cRp}{4\sigma M}}.$$

Задача 1.13. При поочередном освещении поверхности некоторого металла светом с длинами волн λ_1 и λ_2 обнаружили, что соответствующие максимальные скорости фотоэлектронов отличаются друг от друга в η раз. Найти работу выхода с поверхности этого металла. Известно, что $\lambda_1 < \lambda_2$; $\eta > 1$.

При увеличении максимальной скорости в η раз максимальная кинетическая энергия увеличивается в η^2 раз. Поскольку известно, что $\lambda_1 < \lambda_2$; $\eta > 1$,

$$\frac{hc}{\lambda_1} = A_{\text{вых}} + E_{\text{кин}}\eta^2,$$

$$\frac{hc}{\lambda_2} = A_{\text{вых}} + E_{\text{кин}},$$

$E_{\text{кин}}$ – максимальная кинетическая энергия (она в задаче не дана),
$A_{\text{вых}}$ – искомая работа выхода.

Вычитая верхнее уравнение из нижнего, найдем $E_{\text{кин}}$, а затем, сложив уравнения, определим работу выхода:

$$E_{\text{кин}} = \frac{hc}{\eta^2 - 1} \cdot \left(\frac{1}{\lambda_1} - \frac{1}{\lambda_2}\right),$$

$$A_{\text{вых}} = \frac{1}{2} hc \cdot (\left(\frac{1}{\lambda_1} + \frac{1}{\lambda_2}\right) - \frac{\eta^2 + 1}{\eta^2 - 1} \cdot \left(\frac{1}{\lambda_1} - \frac{1}{\lambda_2}\right) =$$

$$= \frac{1}{2} hc \frac{(\lambda_1 + \lambda_2)(\eta^2 - 1) - (\lambda_2 - \lambda_1)(\eta^2 + 1)}{\lambda_1 \lambda_2 (\eta^2 - 1)} = \frac{1}{2} hc \frac{2\lambda_1 \eta^2 - 2\lambda_2}{\lambda_1 \lambda_2 (\eta^2 - 1)} =$$

$$= hc \frac{\eta^2 - \lambda_2/\lambda_1}{\lambda_2 (\eta^2 - 1)}.$$

Задача 1.14. Известно, что для некоторого материала зависимость энергии электрона от волнового вектора неоднозначна и имеет вид, показанный на рисунке 5.

Для кривых:

I: $E = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$,

II: $E = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$.

Требуется определить, какова должна быть наименьшая энергия электрона 1, чтобы стал возможен процесс перехода электрона 2 из кривой II на кривую I. Конечные положения электронов и начальное положение электрона II могут быть любыми (рисунок 6).

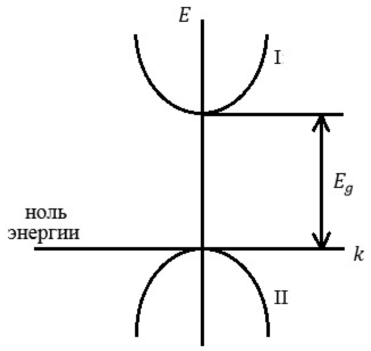


Рисунок 5 – Зависимость энергии электрона от волнового вектора

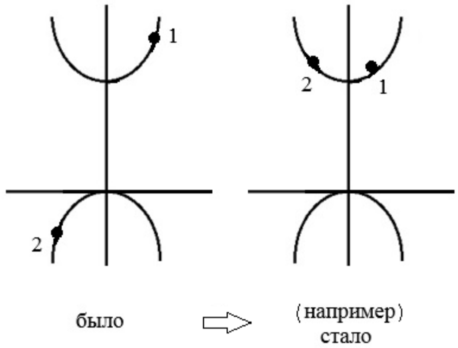


Рисунок 6 – Зависимость энергии электрона от волнового вектора

Законы сохранения энергии и волнового вектора (импульса) для описанного процесса имеют вид:

$$k_1 + k_2 = k_1' + k_2',$$

$$E_g + \frac{\hbar^2 {k_1}^2}{2m^*} - \frac{\hbar^2 {k_2}^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2 {k_1'}^2}{2m^*} + 2E_g + \frac{\hbar^2 {k_2'}^2}{2m^*}.$$

Второе уравнение домножим на $\frac{2m^*}{\hbar}$; тогда получим:

$$\Delta + {k_1'}^2 + {k_2'}^2 + {k_2}^2 - k^2 = 0, \text{где } \Delta = \frac{2m^* E_g}{\hbar^2}.$$

Сюда подставим $k_2' = k_1 + k_2 - k_1'$ (из самого верхнего уравнения)

$$\Delta + {k_1'}^2 + {k_1}^2 + {k_2}^2 + {k_1'}^2 + 2k_1k_2 - 2k_1k_1' - 2k_2k_1' + {k_2}^2 - {k_1}^2 = 0 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \Delta + 2{k_1'}^2 + 2{k_2}^2 + 2k_1k_2 - 2k_1k_1' - 2k_2k_1' = 0 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow 2{k_2}^2 - 2(k_1' - k_1)k_2 + \left(2{k_1'}^2 - 2k_1k_1' + \Delta\right) = 0.$$

Чтобы разрешить это квадратное уравнение относительно k_2, должно быть:

$$D = 4 \cdot (k_1' - k_1)^2 - 8 \cdot \left(2{k_1'}^2 - 2k_1k_1' + \Delta\right) \geq 0 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow 4{k_1'}^2 - 8k_1k_1' + 4{k_1}^2 - 16{k_1'}^2 + 16k_1k_1' - 8\Delta \geq 0 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow -12{k_1'}^2 + 4{k_1}^2 + 8k_1k_1' - 8\Delta \geq 0 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow -8{k_1'}^2 + 2k_1k_1' + \left({k_1}^2 - 2\Delta\right) \geq 0 \quad (*).$$

Необходимо найти наименьшее $|k_1|$, при котором еще существует такое k_1', чтобы удовлетворить последнее неравенство.

Корни у левой части (*) – квадратного уравнения относительно k_1' – существует при

$$\widetilde{D} = 4{k_1}^2 + 12(k^2 - 2\Delta) \geq 0 \quad (**).$$

Если корней нет (то есть если $\widetilde{D} < 0$), то $D < 0$ и (*) не удовлетворяется.

Наименьшее $|k_1|$, отвечающее наличию корней, – это ${k_1}^2 = \frac{3}{2}\Delta$ (это очевидно из рассмотрения неравенства (**)).

Таким образом, наименьшая энергия E_1, необходимая для осуществления процесса, есть:

$$(E_1)_{min} = E_g + \frac{\hbar^2({k_1}^2)_{min}}{2m^*} = E_g + \frac{\hbar^2 \cdot 3 \cdot \frac{2m^* E_g}{\hbar^2}}{2 \cdot 2m^*} = E_g + \frac{3}{2}E_g =$$
$$= \frac{5}{2}E_g.$$

Задача 1.15. Зависимости энергии электрона от волнового вектора для двух различных материалов имеют вид, представленный на рисунке 7:

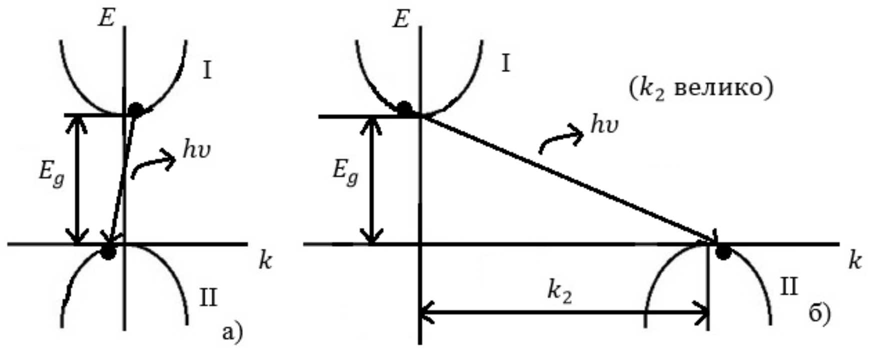


Рисунок 7 – Зависимости энергии электрона от волнового вектора

Рассматривается переход электрона из состояния вблизи минимума зависимости I в состояние вблизи максимума зависимости II с испусканием фотона. Объяснить, какая из ситуаций – «а» или «б» – более благоприятна для осуществления такого излучательного перехода.

Ситуация «а» более благоприятна. Законы сохранения энергии и импульса запишутся (для обоих случаев):

$$E_I(k_I) = E_{II}(k_{II}) + \hbar\omega_{photon},$$
$$k_I = k_{II} + k_{photon},$$
$$|k_{photon}| = \frac{\hbar\omega_{photon}}{\hbar_0}.$$

Если испускается видимый свет, а электрон в состояниях I и II удален от экстремума соответствующей зависимости $E(k)$ на величину порядка $k_B T$, то импульсом фотона k_{photon} можно пренебречь. Оценка дает:

$$k_{electron} \sim \sqrt{2mE} \cdot \frac{1}{\hbar} = \sqrt{2 \cdot (9.1 \cdot 10^{-31}) \cdot 0.026 \cdot (1.6 \cdot 10^{-19})} \cdot \frac{1}{\hbar} \sim$$
$$\sim \frac{0.7 \cdot 10^{-25}}{\hbar} \quad \text{(в системе СИ)},$$

$$k_{photon} \sim \frac{E_{photon}}{c} \cdot \frac{1}{\hbar} = \frac{3\ (\text{эВ}) \cdot (1.6 \cdot 10^{-19})}{3 \cdot 10^8} \cdot \frac{1}{\hbar} \sim \frac{1.6 \cdot 10^{-27}}{\hbar},$$

то есть $k_{electron} \gg k_{photon}$.

В результате

$$k_I \approx k_{II},$$

вследствие чего процесс «б» вообще невозможен, поскольку там K_2 большое и $k_I \approx k_{II}$ не может быть выполнено вблизи экстремумов зависимостей $E(k)$.

В случае «б» переход становится возможным только при участии в его осуществлении третьей частицы. Чаще всего такими частицами являются кванты колебаний кристаллической решетки – фононы, которые могут как испускаться, так и поглощаться. Участие фонона должно быть отражено в записи законов сохранения: в их правую часть следует добавить $\pm E_{phonon}$ и $\pm k_{phonon}$ (более распространенному случаю испускания фонона соответствует верхний знак).

Процессы, требующие участия фонона (фононов), тем более при большом K, заведомо маловероятны.

Задача 1.16. Пользуясь выражением Эйнштейна для тепловой энергии твердого тела:

$$\epsilon = 3N_a h\nu \cdot \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1}.$$

(N_a – число Авогадро, $h\nu$ – энергия фонона), определить теплоемкость c_v и рассмотреть поведение последней в предельных случаях высоких и низких температур.

По определению,

$$c_v = \frac{d\epsilon}{dT} = 3N_a h\nu \cdot \frac{-e^{\frac{h\nu}{k_B T}} \cdot \left(\frac{h\nu}{k_B}\right) \cdot \left(-\frac{1}{T^2}\right)}{\left(e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1\right)^2} =$$

$$= \frac{3N_a \cdot (h\nu)^2}{k_B} \cdot \frac{1}{T^2} \cdot \frac{e^{\frac{h\nu}{k_B T}}}{\left(e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1\right)^2}.$$

Обозначим $e^{\frac{h\nu}{k_B T}} = e^x$.

При высоких T $(k_B T \gg h\nu)$:

$$\frac{e^x}{(e^x - 1)^2} \approx \frac{1}{(1 + x - 1)^2} \approx \frac{1}{(x)^2},$$

то есть

$$c_v = \frac{3N_a (h\nu)^2}{k_B} \cdot \frac{1}{T^2} \cdot \frac{T^2 {k_B}^2}{(h\nu)^2} = 3N_a k_B \text{ (закон Дюлонга и Пти).}$$

При низких T ($k_B T \ll h\nu$):

$$e^x - 1 \approx e^x, \frac{e^x}{(e^x-1)^2} \approx\ e^{-x},$$

после чего

$$c_v = \frac{3N_a(h\nu)^2}{k_B} \cdot \frac{1}{T^2} \cdot e^{\frac{-h\nu}{k_B T}}.$$

2. Соотношение неопределенностей

Решение задач по этому разделу предполагает использование следующего общепринятого математического выражения для соотношения неопределенностей:

$$\Delta x \cdot \Delta p = \hbar,$$

где Δx и Δp – соответственно, неопределенности координаты и импульса частицы. Четкого предписания того, каким образом следует находить Δx и Δp, не предусмотрено. Такое же выражение можно применять и к недекартовой (например, сферической) системе координат.

Более строгое изложение концепции соотношения неопределенностей состоит в следующем. Пусть состояние частицы характеризуется волновой функцией $\Psi(x)$. Тогда, по стандартным формулам для нахождения средних величин, можно получить $< x >, < p >$ а затем – $< (x-< x >)^2 >$ и $< (p-< p >)^2 >$. Можно доказать, что $(x-< x >)^2 \cdot< (p-< p >)^2 \geq \hbar^2/4$. Первый сомножитель слева равен $(\Delta x)^2$, а второй $(\Delta p)^2$,. Именно эта запись является строгим выражением для соотношения неопределенностей. Для конкретных задач, зная Ψ, можно непосредственно проверить приведенное соотношение. Как видим, в своей строгой формулировке оно отличается от общепринятого, во-первых, наличием численного множителя, и, во-вторых, знаком «≥» (вместо «=»).

При решении задач на соотношение неопределенностей функция Ψ обычно неизвестна и находить ее не нужно. В качестве Δx и Δp подставляются характерные для данной конкретной задачи величины. Часто при этом оказывается, что $< x >$=0 и $< p >$=0, и тогда неопределенность величины оказывается порядка самой этой величины, т.е. $\Delta x = x$ и $\Delta p = p$. Понятно, что результат в значительной степени зависит от того, какие именно значения взяты как «характерные». Мотивированный выбор последних может быть неоднозначным. Поэтому использование соотношения неопределенностей никогда не позволяет проводить точные расчеты – оно служит лишь для оценок. Для частиц массы m, находящейся в основном энергетическом состоянии и локализованной в области с линейным размером a, среднеквадратичное значение импульса $p \sim \hbar/a$. Соответственно, скорость $V \sim \hbar/ma$, кинетическая энергия $\sim \hbar^2/ma^2$. При таких оценках численные множители не могут быть определены, поэтому их следует опускать [9].

Задача 2.1. Частица массы движется в одномерном потенциальном поле $U = \kappa x^2/2$. Оценить с помощью соотношения неопределенностей минимально возможную энергию частицы в таком поле.

В силу соотношения неопределенностей, нельзя «одновременно» говорить о координате и импульсе частицы. Имеется некоторое «размытие» как по координате (Δx), так и по импульсу (Δp), причем величины Δx и Δp связаны:

$$\Delta x \cdot \Delta p \sim \hbar.$$

При решении задач на соотношение неопределенностей очень часто возникает неустранимый произвол в выборе того, какие именно величины следует понимать под Δx и Δp. Здесь же, как мы увидим ниже, имеет место тот редкий случай, когда данную трудность можно обойти.

Напомним, что наиболее строгий вид соотношение неопределенностей – это

$$\sqrt{<(<x>-x)^2>} \cdot \sqrt{<(<p>-p)^2>} \geq \hbar/2.$$

Обозначим первый сомножитель левой части как a, а второй – как b (просто для сокращения записи). Именно с таким соотношением неопределенностей мы будем работать, не используя более традиционное соотношение, выписанное в самом начале решения.

$$a \cdot b \geq \hbar/2.$$

Из-за симметрии поля относительно $x = 0$ следует, что $<x>$=0 ($<x>$ – средняя координата частицы). Кроме того,

$$<p>=0,$$

так как иначе состояние не могло бы быть стационарным. Последнее, естественно, не означает, что $<p^2>$=0.

$$\sqrt{<(<x>-x)^2>} = \sqrt{<x^2>} = a,$$
$$\sqrt{<(<p>-p)^2>} = \sqrt{<p^2>} = b.$$

Нас интересует минимально возможное среднее значение энергии:

$$<E>=<T+U>=<\frac{p^2}{2m}>+<\frac{\kappa \cdot x^2}{2}>=\frac{<p^2>}{2m}+\frac{\kappa \cdot <x^2>}{2}.$$

Ввиду наличия неопределенностей импульса и координаты, минимальное E без усреднения могло бы быть и нулем, но о нем говорить нет смысла.

$$\frac{<p^2>}{2m}+\frac{\kappa \cdot <x^2>}{2}=\frac{\sqrt{<p^2>}^2}{2m}+\frac{\kappa \cdot \sqrt{<x^2>}^2}{2}=$$
$$=\frac{b^2}{2m}+\frac{\kappa \cdot a^2}{2} \geq \frac{b^2}{2m}+\frac{\kappa \cdot a^2}{2} \sim$$
$$\sim \frac{\hbar^2}{2m \cdot 4a^2}+\frac{\kappa \cdot a^2}{2}.$$

Эту величину исследуем на минимум по a:

$$\frac{d<E>}{da}=-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{2}{4a^3}+\frac{2 \cdot \kappa \cdot a}{2}=0 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{4m} + \kappa \cdot x^4 \Rightarrow a^2 = \frac{1}{2} \cdot \hbar \cdot (m \cdot \kappa)^{-1/2}.$$

Подставляя это в выражение для энергии, имеем:

$$< E >_{min} = \frac{\hbar^2 \cdot \sqrt{m\kappa}}{2m \cdot 2\hbar} + \frac{\kappa}{2} \cdot \frac{\hbar}{2} \cdot \sqrt{\frac{\kappa}{m}} = \frac{\hbar}{2} \cdot \sqrt{\frac{\kappa}{m}}.$$

Задача 2.2. Свободный электрон в момент $t_0 = 0$ локализован в области Δx_0. Оценить ширину области локализации этого электрона спустя время t.

Без знания конкретных волновых функций можно провести лишь грубую оценку.

Выберем систему отсчета так, чтобы средний импульс был нулевым:

$$< p > = 0.$$

Соотношение неопределенностей позволяет связать неопределенность координаты частицы в начальный момент с неопределенностью импульса:

$$\Delta p \sim \frac{\hbar}{\Delta x_0}.$$

Величина Δp – это

$$\Delta p = \sqrt{< p^2 >},$$

так как $< p > = 0$.

Примем, что величина

$$\mathrm{v} = \sqrt{< p^2 >} \cdot \frac{1}{m}$$

характеризует скорость «расширения» области локализации. Тогда размер области локализации «l» зависит от времени как

$$\mathrm{l} = v \cdot t = \frac{1}{m} \cdot \frac{\hbar}{\Delta x_0} t = \frac{\hbar}{\Delta x_0 \cdot m} t.$$

Задача 2.3. Оценить энергию ионизации атома водорода и радиус орбиты электрона в основном состоянии.

Полная энергия электрона в атоме водорода складывается из потенциальной и кинетической:

$$< E > = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r}.$$

Если электрон локализован в области размером порядка r, то $p \sim \hbar / r$, поэтому:

$$E \sim \frac{\hbar^2}{2mr^2} - \frac{e^2}{r}.$$

Это выражение как функция r имеет минимум. Из условия $dE/dr = 0$ находим боровский радиус:

$$r_B \sim \frac{\hbar^2}{me^2}.$$

Подставляя это значение в выражение для E, находим энергию основного состояния:

$$E_0 \sim -\frac{m \cdot e^4}{2\hbar^2}.$$

Численный множитель $(1/2)$ при такой оценке надо опустить, хотя фактически полученный в данной задаче результат является точным. Видно, что при $\hbar \to 0$ будет $r_B \to 0, E \to -\infty$, как и должно быть в классическом пределе, когда наинизшему энергетическому состоянию соответствует падение электрона на ядро.

Ответ: $r \sim 10^{-8}$см, $E \sim 10$ эВ.

Задача 2.4. Оценить энергию основного состояния частицы массы m в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками и с шириной a.

Полная энергия электрона в квантовой яме с бесконечно высокими стенками равна:

$$E = \frac{p^2}{2m}.$$

Характерная область локализации электрона – порядка ширины квантовой ямы (a). Тогда, согласно принципу неопределенностей:

$$p \cdot a \sim \hbar.$$

Следовательно,

$$E = \frac{\hbar^2}{ma^2}.$$

Задача 2.5. Оценить энергию основного состояния частицы массы m, закрепленной на пружине с жесткостью k.

Полная энергия частицы массы m, закрепленной на пружине, равна:

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2},$$

где $\omega^2 = k/m$, k – жесткость пружины, x – координата частицы относительно положения равновесия. Для основного состояния $p \cdot x \sim \hbar$, тогда

$$E \sim \frac{\hbar^2}{mx^2} + m\omega^2 x^2.$$

Минимальное значение энергии, то есть энергия основного состояния, определяется из условия:

$$\frac{dE}{dx} = -\frac{2 \cdot \hbar^2}{mx^3} + 2 \cdot \omega^2 \cdot x^2 = 0.$$

Отсюда $(x^2)_{min} \sim \hbar/m\omega$, так что

$$E_{min} \sim \hbar\omega.$$

Задача 2.6. Оценить амплитуду колебаний маятника массой $m = 1$ гр и длиной $l = 1$ м в поле силы тяжести.

Полная энергия маятника, совершающего нулевые колебания амплитуды a, имеет вид:

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 a^2}{2}.$$

Здесь $\omega^2 = g/l$ (g – ускорение свободного падения).
Из соотношения неопределенностей,

$$p \cdot a \sim \hbar,$$

после чего получается:

$$E \sim \frac{\hbar^2}{ma^2} + m\omega^2 a^2.$$

Это выражение имеет минимум при некотором a_{min}, которое и отвечает искомой амплитуде. Минимум находится после приравнивания нулю производной dE/da и равен:

$$a_{min} = (\frac{\hbar}{m\omega})^{1/2} \sim 10^{-18} \text{ см}, \omega^2 = g/l.$$

Задача 2.7. Оценить энергию и радиус орбиты частицы (заряд q, масса m) в основном состоянии в магнитном поле Земли ($H = 1$ Э).

Полная энергия частицы в присутствии магнитного поля равна

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\Omega^2 x^2}{2},$$

где $\Omega = \mu_0 q \cdot H/m$ – циклотронная частота. Если частица локализована в области размером порядка a, то

$$p \cdot a \sim \hbar.$$

Следовательно,

$$E \sim \frac{\hbar^2}{2ma^2} + \frac{m\Omega^2 a^2}{2}.$$

Это выражение для E, как функция a, имеет минимум при

$$a_{min} \sim (\frac{\hbar}{\mu_0 q \cdot H})^{1/2}.$$

Подставляя полученное «a» в выражение для E, имеем: $E \sim \hbar\Omega$.

Ответ: $E \sim 10^{-6}$эВ, $a \sim 10^{-7}$см.

Задача 2.8. Оценить, какими были бы энергия ионизации и боровский радиус атома водорода, если бы между электроном и ядром действовали не электрические, а гравитационные силы.

Полная энергия электрона в атоме водорода при действии гравитационных сил, вместо электрических, запишется:

$$E = \frac{p^2}{2m} - \gamma \frac{mM}{r}.$$

здесь γ – постоянная Всемирного тяготения, m и M – соответственно, массы электрона и протона.

Из принципа неопределенностей,

$$p \sim \frac{\hbar}{r}.$$

Это соотношение подставляем в выражение для E, а затем находим, при каком $r = r_{min}$ достигается минимум энергии. Для этого берется производная dE/dr и приравнивается к нулю для нахождения r_{min}. Получается:

$$r_{min} \sim \frac{\hbar^2}{\gamma m^2 M}.$$

После подстановки этого r_{min} в выражение для энергии находим энергию ионизации:

$$E \sim \frac{\gamma^2 \cdot m^3 \cdot M}{\hbar^2}.$$

Задача 2.9. Оценить энергию основного состояния частицы массы в треугольной яме: $U = \infty$ при $x < 0$, $U = F \cdot x$ при $x > 0$.

Полная энергия частицы массы m в треугольной потенциальной яме равна

$$E = \frac{p^2}{2m} + F \cdot x.$$

В треугольной потенциальной яме, согласно принципу неопределенностей, $p \cdot x \sim \hbar$. Это соотношение подставляется, как если бы это было равенство, в выражение для E, затем находится dE/dx и приравнивается к нулю. Нуль производной достигается при $x = x_{min}$:

$$x_{min} \sim (\frac{\hbar^2}{m \cdot F})^{1/3}.$$

Для энергии основного состояния после этого получаем:

$$E = \frac{\hbar^2}{2 \cdot m \cdot x_{min}^2} + F \cdot x_{min} = \left(\frac{\hbar^2 \cdot F^2}{m}\right)^{\frac{1}{3}}.$$

Задача 2.10. Оценить дебройлевскую длину волны электрона в полупроводнике InSb при температуре жидкого гелия (4.2 K). Эффективная масса электрона равна $m^* = 10^{-29}$ г.

Характерная скорость электрона в полупроводнике при низких температурах по порядку величины равна $(E_T/2m^*)^{1/2}$, где E_T – характерная тепловая энергия ($k_B T$), k_B – постоянная Больцмана. Поскольку производится оценка, числовые множители («1/2») следует опустить. Итак, характерная скорость:

$$v \sim (k_B T/m^*)^{1/2}.$$

При этом характерный импульс:

$$p = m^* \cdot v \sim (m^* k_B T)^{\frac{1}{2}},$$

а дебройлевская длина волны, определяемая из соотношения:

$$p \cdot \lambda \sim \hbar$$

получается равной

$$\lambda \sim \hbar \cdot (m^* k_B T)^{-\frac{1}{2}} \sim 10^{-5} \text{ см}.$$

Задача 2.11. Оценить глубину проникновения a электрона с энергией E под прямоугольный потенциальный барьер высотой U.

Импульс частицы при ее нахождении под барьером является чисто мнимой величиной, по модулю равной:

$$|p| = \sqrt{2 \cdot m \cdot (U - E)},$$

причем поскольку производится оценка, численный множитель («2» под корнем) можно опустить. С учетом последнего, соотношение неопределенностей $a \cdot |p| \sim \hbar$ запишется:

$$a \cdot \sqrt{m \cdot (U - E)} \sim \hbar,$$

откуда характерный размер (глубина проникновения) найдется как:

$$a \sim \frac{\hbar}{\sqrt{m \cdot (U - E)}}.$$

Задача 2.12. Оценить порядок величины разброса точек попадания в мишень при оптимальных условиях стрельбы пулями с массой $m = 9$ гр при расстоянии до мишени $l = 100$ м и начальной скорости пули $V = 10^3$ м/с. Пулю рассматривать как материальную точку, сопротивлением воздуха пренебречь.

Если неопределенность координаты пули в направлении, перпендикулярном направлению стрельбы, Δx, то неопределенность перпендикулярной проекции ее начального импульса $\Delta p \sim \hbar/\Delta x$. Разброс точек попадания, обусловленный неопределенностями Δx и Δp, $\delta \sim \Delta x + \frac{\Delta p}{p} l \sim \Delta x + \hbar l / p \Delta x$. Это выражение как функции Δx имеет минимум при $\Delta x \sim (\hbar l/p)^{1/2}$. Отсюда минимальный разброс $\delta \sim (\hbar l/p)^{1/2} \sim (l\lambda)^{1/2}$, где $\lambda \sim \hbar/p$ – дебройлевская длина волны пули. В классическом пределе $(\hbar \to 0)$ $\delta \to 0$, как и должно быть.

Ответ: $\delta \sim (l\lambda)^{1/2} \sim 10^{-18}$ см. Этот результат показывает ничтожную роль квантовых эффектов для макроскопических объектов.

Задача 2.13. Показать, что если потенциальная энергия частицы в поле силового центра есть $U(r) = -\alpha/r^3$, то происходит падение частиц на центр.

Задача 2.14. Идеально упругий шарик массой $m = 1$ гр в вакууме падает на идеально упругий стол радиусом $R = 1$ м с высоты $l = 10$ м. Оценить максимальное число N отскоков шарика от стола.

Ответ: $N \sim \frac{mR^2}{\hbar} (g/l)^{1/2} \sim 10^{31}$, g – ускорение свободного падения.

Задача 2.15. Оценить величину тока, протекающего в идеальном колебательном контуре с емкостью $C = 10^{-8}$Ф и индуктивностью $L = 10^{-4}$ Гн при нулевых колебаниях. Указание: воспользоваться механической аналогией.

Ответ: $I \sim \hbar^{1/2} L^{-3/4} C^{-1/4} \sim 10^{-12}$А.

Задача 2.16. Оценить скорость $1s$ –электрона в атоме свинца ($Z = 82$).

Ответ: $V \sim Ze^2/\hbar \sim 10^{10}$см/с.

Задача 2.17. Оценить скорость, которую приобретает первоначально неподвижный атом водорода в результате испускания кванта света с частотой $\omega = 10^{16}$ с$^{-1}$.

Ответ: $V{\sim}\hbar\omega/Mc{\sim}10^2$ см/с, M —масса протона.

Задача 2.18. Оценить ширину $\Delta\omega$ спектральной линии, испускаемой атомом, если время жизни атома в возбужденном состоянии $\tau = 10^{-3}$с.

Ответ: $\Delta\omega{\sim}1/\tau{\sim}10^3$с$^{-1}$.

Задача 2.19. Оценить разброс по скоростям ΔV α —частиц, образующихся при α —распаде ядра с периодом полураспада $\tau = 10^{-18}$с. Средняя энергия α —частиц $E = 1$ МэВ.

Ответ: $\Delta V{\sim}\hbar/\tau\sqrt{mE}{\sim}10^5$см/с, m —масса α —частицы.

Задача 2.20. Во Вселенной существует реликтовое равновесное излучение с температурой $T \approx 3$ К. Оценить плотность фотонов во Вселенной.

Ответ: $n{\sim}(kT/\hbar c)^3{\sim}10^3$см$^{-3}$.

3. Операторы в квантовой механике. Вычисление вероятностей и средних значений

Под оператором понимается предписание (или совокупность предписаний) того, какие действия необходимо совершить с волновой функцией Ψ, на которую оператор действует [9].

Среднее значение любого оператора $\hat{A}$ находится по формуле:

$$<\hat{A}> = \int_V \Psi^* \cdot \hat{A} \cdot \Psi \cdot \mathrm{dV}.$$

Здесь Ψ – нормированная (на единицу в объеме V) волновая функция того состояния, в котором исследуются средние значения.

Вероятность нахождения частицы, состояние которой описывается волновой функцией Ψ, в области пространства V′ есть

$$P = \int_{V'} \Psi^* \cdot \Psi \cdot \mathrm{dV}.$$

Собственные функции φ и собственные значения а оператора $\hat{A}$ определяются из решения уравнения (с граничными условиями):

$$\hat{A} \cdot \varphi = \mathrm{a} \cdot \varphi.$$

Собственные значения эрмитовых операторов вещественны, а их собственные функции ортогональны (или могут быть ортогонализованы) и образуют полную систему. Собственные значения a_n оператора $\hat{A}$, соответствующего физической величине $A(p,q)$, определяют возможные значения, которые может принимать эта физическая величина (ее спектр).

Пусть $\hat{A}$ имеет дискретный спектр $(\varphi = \varphi_n, a = \mathrm{a}_n, n = 1,2,3 \ldots)$. Тогда, если дана функция ϕ, описывающая состояние системы, то вероятность нахождения системы в состоянии φ_n (в котором величина, отождествляемая с оператором $\hat{A}$, имеет значение a_n) есть

$$P_n = \left| \iint_V \phi \cdot \varphi_n{}^* \cdot \mathrm{dV} \right|^2.$$

Если спектр $\hat{A}$ непрерывный ($\varphi = \varphi_a$), то вероятность того, что значение этой величины находится в пределах ($\mathrm{a}_{min}; \mathrm{a}_{max}$), будет:

$$P(\mathrm{a}_{min}; \mathrm{a}_{max}) = \left(\int_{\mathrm{a}_{min}}^{\mathrm{a}_{max}} \left| \iint_V \phi \cdot \varphi_a{}^* \cdot \mathrm{dV} \right|^2 \cdot \mathrm{da} \right) \cdot$$

$$\cdot \left(\int_{\text{по всем } a} \left| \iint_V \phi \cdot \varphi_a{}^* \cdot \mathrm{dV} \right|^2 \cdot \mathrm{da} \right)^{-1}.$$

Задача 3.1. Найти вид оператора $l_x l_y - l_y l_x$, где l_x, l_y – операторы проекций момента импульса на декартовы оси.

$$l_x l_y = (y\hat{p}_z - z\hat{p}_y)(z\hat{p}_x - x\hat{p}_z) = y\hat{p}_z z\hat{p}_x - y\hat{p}_z x\hat{p}_z - z\hat{p}_y z\hat{p}_x + z\hat{p}_y x\hat{p}_z,$$

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

Операторы проекций импульса и координат, относящихся к различным осям, коммутируют между собой, вследствие чего можно менять порядок их следования в «произведении», например, всегда можно переставлять $\hat{p}_y$ и z. Кроме того, коммутируют различные проекции импульса между собой (например, $\hat{p}_z$ и $\hat{p}_x$), а также координаты между собой (например, y и x).

Пользуясь этим, получаем:

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

Рассмотрим отдельно первый сомножитель, проанализировав его действие на произвольную волновую функцию Ψ:

$$(\hat{p}_z z - z\hat{p}_z)\Psi = -i\hbar \cdot \left(\frac{\partial}{\partial \mathrm{z}}(\mathrm{z}\Psi) - \mathrm{z}\frac{\partial}{\partial \mathrm{z}}\Psi\right) =$$
$$= -i\hbar \cdot \left(\Psi + \mathrm{z}\frac{\partial \Psi}{\partial \mathrm{z}} - \mathrm{z}\frac{\partial \Psi}{\partial \mathrm{z}}\right) = -\mathrm{i}\hbar\Psi.$$

Получилось:

$$l_x l_y - l_y l_x = -i\hbar \cdot (y\hat{p}_x - x\hat{p}_y) = -i\hbar(-l_z) = i\hbar l_z.$$

Примечание: аналогично $l_y l_z - l_z l_y = i\hbar l_x$ и $l_z l_x - l_x l_z = i\hbar l_y$.

Задача 3.2. Найти явный вид оператора $\exp(\mathrm{i}\pi\,\hat{\uparrow})$, где $\hat{\uparrow}$ – оператор отражения

$\uparrow \Psi(\mathrm{x}) = \Psi(-\mathrm{x})$.

$$\exp(\mathrm{i}\pi \uparrow) = \cos(\pi \uparrow) + i\sin(\pi \uparrow) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\pi \uparrow)^{2n}}{(2n)!} \cdot (-1)^{2n} +$$

$$+i \cdot \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\pi \uparrow)^{2n+1}}{(2n+1)!} \cdot (-1)^{n} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\pi)^{2n}}{(2n)!} \cdot (-1)^{n} +$$

$$+i \cdot\uparrow\cdot \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\pi)^{2n+1} \cdot\uparrow^{2n}}{(2n+1)!} \cdot (-1)^{n} =$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\pi)^{2n}}{(2n)!} \cdot (-1)^{n} + i \cdot\uparrow\cdot \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\pi)^{2n+1}}{(2n+1)!} \cdot (-1)^{n} =$$

$$= \cos(\pi) + i \cdot\uparrow\cdot \sin(\pi) = -1.$$

то есть

$$[\exp(\mathrm{i}\pi \uparrow)]\Psi(\mathrm{x}) = -\Psi(\mathrm{x}).$$

В решении использованы следующие математические формулы:

а) $\exp(i\varphi) = \cos(\varphi) + i \cdot \sin(\varphi)$,

б) $\uparrow = 1 \cdot$ поскольку $\uparrow \big(\uparrow \Psi(\mathrm{x})\big) = \uparrow \Psi(-\mathrm{x}) = \Psi\big(-(-\mathrm{x})\big) = \Psi(\mathrm{x})$,

в) $\uparrow^{2n} = 1 \cdot$ (очевидно, так как $\uparrow^2 = 1$),

г) $\sin(a) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\mathrm{a})^{2n+1}}{(2n+1)!} \cdot (-1)^{n}$,

д) $\cos(\mathrm{a}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\mathrm{a})^{2n}}{(2n)!} \cdot (-1)^{n}$.

Задача 3.3. Вычислить а) $l_x\hat{p}_y - \hat{p}_x l_x$, б) $l_x\hat{p}_y - \hat{p}_y l_x$.

$$l_x = -i\hbar \cdot \left(\mathrm{y}\frac{\partial}{\partial \mathrm{z}} - \mathrm{z}\frac{\partial}{\partial \mathrm{y}}\right),$$

$$\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial \mathrm{x}}, \hat{p}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial \mathrm{y}}.$$

а) $l_x\hat{p}_x - \hat{p}_x l_x$ поскольку «$\frac{\partial}{\partial \mathrm{x}}$» коммутирует и с «y», и с «z», и с «$\frac{\partial}{\partial \mathrm{y}}$», и с «$\frac{\partial}{\partial \mathrm{z}}$».

б) $l_x\hat{p}_y - \hat{p}_y l_x = -i\hbar \cdot \left(\mathrm{y}\frac{\partial}{\partial \mathrm{z}} - \mathrm{z}\frac{\partial}{\partial \mathrm{y}}\right)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial \mathrm{y}}\right) -$

$$-\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial \mathrm{y}}\right)\left(-i\hbar\left(\mathrm{y}\frac{\partial}{\partial \mathrm{z}} - \mathrm{z}\frac{\partial}{\partial \mathrm{y}}\right)\right) = -\hbar^2\left(\mathrm{y}\frac{\partial^2}{\partial \mathrm{z}\,\partial \mathrm{y}} - z\frac{\partial^2}{\partial \mathrm{y}^2}\right) +$$

$$+\hbar^2\left(\frac{\partial}{\partial \mathrm{y}}\left(y\frac{\partial}{\partial \mathrm{z}}\right) - z\frac{\partial^2}{\partial \mathrm{y}^2}\right) =$$

$$= -\hbar^2\left(\mathrm{y}\frac{\partial^2}{\partial \mathrm{z}\,\partial \mathrm{y}} - z\frac{\partial^2}{\partial \mathrm{y}^2} - \frac{\partial}{\partial \mathrm{z}} - y\frac{\partial^2}{\partial \mathrm{y}\,\partial \mathrm{z}} + z\frac{\partial^2}{\partial \mathrm{y}^2}\right) =$$

$$= \hbar^2\frac{\partial}{\partial \mathrm{z}} = i\hbar\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial \mathrm{z}}\right) = i\hbar\hat{p}_z.$$

Задача 3.4. Убедиться в том, что результат действия оператора уничтожения $\hat{\mathrm{b}}$ на волновую функцию осциллятора Ψ_n есть: $\mathrm{b}\Psi_n = \sqrt{n} \cdot \Psi_{n-1}$.

Известен вид осцилляторной функции:

$$\Psi_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n!\, \pi^{1/2} l}} \cdot e^{-x^2/2l^2} \cdot H_n(\frac{x}{l}),$$

а также явный вид оператора уничтожения:

$$\mathrm{b} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi + \frac{\partial}{\partial \xi}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{x}{l} + l\frac{\partial}{\partial x}\right).$$

Вычисление $\mathrm{b}\Psi_n$ дает:

$$\mathrm{b}\Psi_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n!\, \pi^{\frac{1}{2}} l}} \cdot (\frac{x}{l} e^{-\frac{x^2}{2l^2}} \cdot H_n\left(\frac{x}{l}\right) - l\frac{2x}{2l^2} e^{-\frac{x^2}{2l^2}} \cdot H_n\left(\frac{x}{l}\right) +$$

$$+ l e^{-\frac{x^2}{2l^2}} \cdot H'_n\left(\frac{x}{l}\right)\frac{1}{l}) \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2^{n+1} n!\, \pi^{\frac{1}{2}} l}} \cdot e^{-\frac{x^2}{2l^2}} \cdot 2\mathrm{n} H_{n-1}\left(\frac{x}{l}\right).$$

Мы воспользовались тем, что

$$H'_n(\xi) = 2n H_{n-1}(\xi), \xi = \frac{x}{l}.$$

Далее

$$\mathrm{b}\Psi_n = \frac{1}{2\sqrt{2^{n-1}(n-1)!\, \pi^{\frac{1}{2}} l}} \cdot \frac{1}{\sqrt{n}} \cdot e^{-\frac{x^2}{2l^2}} \cdot 2\mathrm{n} H_{n-1}\left(\frac{x}{l}\right) =$$

$$= \frac{\sqrt{n}}{\sqrt{2^{n-1}(n-1)!\, \pi^{\frac{1}{2}} l}} \cdot e^{-\frac{x^2}{2l^2}} \cdot H_{n-1}\left(\frac{x}{l}\right) = \sqrt{n} \cdot \Psi_{n-1},$$

что и требовалось.

Задача 3.5. Найти величины $< x^2 >$ и $< p^2 >$ для первого возбужденного состояния гармонического осциллятора.

Волновая функция частицы в первом возбужденном состоянии имеет вид:

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2^1 1!\, \pi^{1/2} l}} \cdot e^{-\frac{x^2}{2l^2}} \cdot H_1\left(\frac{x}{l}\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi^{\frac{1}{2}} l}} \cdot e^{-\frac{x^2}{2l^2}} \cdot 2\left(\frac{x}{l}\right).$$

здесь $l = (\frac{\hbar}{m\omega})^{1/2}$ а H_n – полином Эрмита; у нас $n = 1$ и $H_1 = \frac{x}{l}$. .

$$< x^2 >= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \hat{x}^2 \Psi \mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2\pi^{\frac{1}{2}} l} \cdot 4\frac{x^2}{l^2} \cdot e^{-\frac{x^2}{l^2}} \cdot x^2 \mathrm{d}x =$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{2}{\pi^{\frac{1}{2}} l^3} \cdot x^4 \cdot e^{-\frac{x^2}{l^2}} \cdot \mathrm{d}x = \frac{4}{\pi^{\frac{1}{2}} l^3} \int_0^{+\infty} x^4 \cdot e^{-\frac{x^2}{l^2}} \cdot \mathrm{d}x =$$

$$= \frac{4}{\pi^{\frac{1}{2}} l^3} \cdot \frac{3\pi^{\frac{1}{2}}}{8} - \left(\frac{1}{l^2}\right)^{-\frac{5}{2}} = \frac{3}{2} l^2.$$

Для вычисления $< p^2 >$ предварительно найдем Ψ'':

$$\Psi' = \frac{1}{\sqrt{2\pi^{\frac{1}{2}} l}} \cdot \frac{2}{l} \left(x \cdot e^{-\frac{x^2}{2l^2}} \right)'_x =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi^{\frac{1}{2}} l}} \cdot \frac{2}{l} \left(e^{-\frac{x^2}{2l^2}} - x e^{-\frac{x^2}{2l^2}} \frac{2x}{2^{-2}} \right) =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi^{\frac{1}{2}} l}} \cdot \frac{2}{l} (e^{-\frac{x^2}{2l^2}} - \frac{x^2}{l^2} e^{-\frac{x^2}{2l^2}})$$

$$\Psi'' = \frac{1}{\sqrt{2\pi^{\frac{1}{2}} l}} \cdot \frac{2}{l} \left(-\frac{2x}{2l^2} e^{-\frac{x^2}{2l^2}} - \frac{2x}{l^2} e^{-\frac{x^2}{2l^2}} + \frac{x^2}{l^2} e^{-\frac{x^2}{2l^2}} \cdot \frac{2x}{2l^2} \right) =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi^{\frac{1}{2}} l}} \cdot \frac{2}{l} \left(-3 \frac{x}{l^2} e^{-\frac{x^2}{2l^2}} + \frac{x^3}{l^4} e^{-\frac{x^2}{2l^2}} \right).$$

Теперь:

$$< p^2 >= -\hbar^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \frac{\partial^2}{\partial \mathrm{x}^2} \Psi \mathrm{dx} = -\hbar^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi^{\frac{1}{2}} l}} \cdot \frac{2}{l} x e^{-\frac{x^2}{2l^2}} \cdot$$

$$\cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi^{\frac{1}{2}} l}} \cdot \frac{2}{l} \left(-3 \frac{x}{l^2} e^{-\frac{x^2}{2l^2}} + \frac{x^3}{l^4} e^{-\frac{x^2}{2l^2}} \right) \cdot \mathrm{dx} =$$

$$= -\frac{4\hbar^2}{2\pi^{\frac{1}{2}} l^2} \cdot 2 \int_0^{+\infty} \left(-3 \frac{x^2}{l^2} e^{-\frac{x^2}{l^2}} + \frac{x^4}{l^4} e^{-\frac{x^2}{l^2}} \right) \cdot \mathrm{dx} =$$

$$= -\frac{4\hbar^2}{\pi^{\frac{1}{2}} l^3} \left(-\frac{3}{l^2} \int_0^{+\infty} x^2 e^{-\frac{x^2}{l^2}} \mathrm{dx} + \frac{1}{l^4} \int_0^{+\infty} x^4 e^{-\frac{x^2}{l^2}} \mathrm{dx} \right) =$$

$$= -\frac{4\hbar^2}{\pi^{\frac{1}{2}} l} \left(-\frac{3}{l^2} \frac{\pi^{\frac{1}{2}} \left(\frac{1}{l^2}\right)^{-\frac{3}{2}}}{4} + \frac{1}{l^4} \frac{3\pi^{\frac{1}{2}} \left(\frac{1}{l^2}\right)^{-\frac{5}{2}}}{8} \right) =$$

$$= -\frac{4\hbar^2}{\pi^{\frac{1}{2}} l^3}\left(-\frac{3}{4} + \frac{3}{8} l\right) = \frac{3}{2}\frac{\hbar^2}{l^2}.$$

Задача 3.6. Волновая функция некоторой частицы массы m имеет вид: $\Psi = \mathrm{A} \cdot \exp(-\alpha x^2)$, $\alpha > 0$ – известно. Найти $\mathrm{A}, < \mathrm{x} >, < (< x > -x)^2 >, < p >, < (< p > -p)^2 >, < \mathrm{T} >$; проверить выполнение соотношения неопределенностей.

а) «А» находится из условий нормировки. Так как Ψ – вещественна, оно выглядит:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^2 dx = 1 \Rightarrow 1 = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{A}^2 e^{-2\alpha x^2} dx = \mathrm{A}^2 \frac{\pi^{\frac{1}{2}}(2\alpha)^{-1/2}}{2} \cdot 2 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow A = \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{1/4}.$$

б) $< \mathrm{x} >= \int_{-\infty}^{+\infty} x\Psi^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{A}^2 x e^{-2\alpha x^2} dx = 0$, так как под интегралом – нечетная функция;

в) $< (< x > -x)^2 >=< x^2 >$ так как $< x >= 0$,

$$< x^2 >= \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{x}^2\Psi^2 dx = \mathrm{A}^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{x}^2 e^{-2\alpha x^2} dx = \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot \frac{\pi^{\frac{1}{2}}(2\alpha)^{-\frac{3}{2}}}{2} =$$

$$= \frac{\pi^{\frac{1}{2}} 2^{1/2}\alpha^{1/2}}{2\pi^{\frac{1}{2}} 2^{3/2}\alpha^{3/2}} = \frac{1}{4\alpha};$$

г) $< p >= \int_{-\infty}^{-\infty} \Psi(-i\hbar)\frac{\partial}{\partial \mathrm{x}}\Psi \mathrm{dx} = -i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} A e^{-2\alpha x^2} \cdot \left(-2\mathrm{A}\alpha x e^{-2\alpha x^2}\right) dx = 0$ так как интегрируется нечетная функция;

д) $< (< p > -p)^2 >=< p^2 >$ так как $< p >= 0$;

предварительно найдем Ψ'':

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial \mathrm{x}^2} = \frac{\partial}{\partial \mathrm{x}}\left(-2\mathrm{A}\alpha x e^{-2\alpha x^2}\right) = -2\mathrm{A}\alpha e^{-2\alpha x^2} + 4A\alpha^2 x^2 e^{-2\alpha x^2}$$

$$< p^2 >= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi \cdot \hat{p}^2 \cdot \Psi \cdot \mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi \cdot (i\hbar)^2 \cdot \frac{\partial^2}{\partial \mathrm{x}^2}\Psi \cdot \mathrm{d}x =$$

$$= -\hbar^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi \cdot \frac{\partial^2\Psi}{\partial \mathrm{x}^2} \cdot \mathrm{d}x = -\hbar^2 \int_{-\infty}^{+\infty} A^2 \cdot e^{-\alpha x^2}\left(4\alpha^2 x^2 e^{-\alpha x^2} - 2\alpha e^{-\alpha x^2}\right)\mathrm{d}x =$$

$$= \hbar^2 \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \left(2\alpha e^{-2\alpha x^2} - 4\alpha^2 x^2 e^{-2\alpha x^2}\right) dx =$$

$$= \hbar^2 \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \left(2\alpha \frac{\pi^{\frac{1}{2}}}{(2\alpha)^{\frac{1}{2}} \cdot 2} \cdot 2 - 4\alpha^2 \frac{\pi^{\frac{1}{2}}}{(2\alpha)^{\frac{3}{2}} \cdot 2}\right) =$$

$$= \hbar^2 \frac{2^{\frac{1}{2}}(\alpha)^{\frac{1}{2}}}{(\pi)^{\frac{1}{2}}}\left(\frac{4}{2\cdot 2^{\frac{1}{2}}} - \frac{2}{2^{\frac{3}{2}}}\right)\cdot(\pi)^{\frac{1}{2}}(\alpha)^{\frac{1}{2}} = \hbar^2\alpha;$$

е) $< \mathrm{T} > = < \frac{p^2}{2m} > = \frac{<p^2>}{2m} = \frac{\hbar^2\alpha}{2m}$;

ж) соотношение неопределенностей в его «строгой» форме записывается:

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}.$$

Чтобы проверить это соотношение в рамках данной конкретной задачи, необходимо решить, какие величины мы будем понимать здесь под Δx и Δp. Для подстановки в соотношение неопределенностей следует взять:

$$\Delta x = \sqrt{< (< x > - x)^2 >},$$
$$\Delta p = \sqrt{< (< p > - p)^2 >}.$$

Если так, то

$$\Delta x \cdot \Delta p = \sqrt{< (< x > - x)^2 > \cdot < (< p > - p)^2 >} =$$
$$= \sqrt{< x >^2 \cdot < p >^2} = \sqrt{\frac{1}{4\alpha}\cdot\hbar^2\alpha} = \frac{\hbar}{2},$$

(выполняется $\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$).

Примечание: в решении неоднократно использовалось, что

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-\xi x^2)\cdot dx = 2\int_{0}^{+\infty} \exp(-\xi x^2)\cdot dx = 2\cdot\frac{(\pi)^{\frac{1}{2}}(\xi)^{\frac{-1}{2}}}{2},$$
$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^2\cdot\exp(-\xi x^2)\cdot dx = 2\int_{0}^{+\infty} x^2\cdot\exp(-\xi x^2)\cdot dx = 2\cdot\frac{(\pi)^{\frac{1}{2}}(\xi)^{\frac{-3}{2}}}{4}.$$

Задача 3.7. Частица находится в сферически-симметричном потенциальном поле в стационарном состоянии $\Psi = (2\pi a)^{-1/2}\exp(-r/a)/r$, где r – расстояние от центра поля. Найти $< r >$.

Если Ψ – волновая функция для стационарного состояния, то величина $f = \Psi\cdot\Psi^*$ – плотность распределения частицы по координатам (именно по трем координатам: r, Θ, φ – сферической системы, а не по одной координате r).

Получим вначале плотность распределения $\tilde{f}$ частицы по одной координате r, для чего проинтегрируем f по углам:

$$\tilde{f} = \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} f\cdot\sin(\Theta)\,\mathrm{d}\Theta\mathrm{d}\varphi = 4\pi\Psi(r)\cdot\Psi^*(r).$$

Среднее удаление от центра находится как:

$$< r >= \int_0^{+\infty} r \cdot \tilde{f} \cdot r^2 dr.$$

Тот факт, что $\tilde{f}$ – это плотность распределения по координате r сферической системы, отражен наличием дополнительного множителя «r^2» под интегралом.

$$< r >= \int_0^{+\infty} r \cdot (4\pi \cdot \frac{1}{2\pi a} e^{-\frac{2r}{a}} \frac{1}{r^2}) \cdot r^2 dr = \frac{2}{a} \int_0^{+\infty} r \cdot e^{-\frac{2r}{a}} dr =$$

$$= \frac{2}{a} \frac{1}{(2/a)^2} = \frac{a}{2}.$$

Задача 3.8. Найти вероятность W того, что в основном состоянии гармонического осциллятора частица находится в классически недоступной области.

Плотность вероятности нахождения частицы в точке x есть $|\Psi(\mathrm{x})|^2$, где

$$\Psi(\mathrm{x}) = \pi^{-1/4} a^{1/4} \exp\left(-\frac{ax^2}{2}\right) -$$

волновая функция гармонического осциллятора в основном состоянии ($a = m\omega/\hbar$). Для нахождения W следует проинтегрировать $|\Psi(\mathrm{x})|^2$ по классически недоступной части области изменения x. Эта область определяется условием $U(x) > E$. В нашем случае $U(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2}, E = \hbar\omega/2$. Границы классически недоступной области x_0 определяются условием $U(x_0) = E$, откуда $x_0 = \pm a^{-1/2}$. Следовательно, эта область лежит при $x < -a^{-1/2}$ и при $x > a^{1/2}$.

$$\mathrm{W} = \int_{-\infty}^{-a^{-1/2}} |\Psi(\mathrm{x})|^2 dx + \int_{a^{-1/2}}^{+\infty} |\Psi(\mathrm{x})|^2 dx = 2 \cdot \int_{a^{-\frac{1}{2}}}^{+\infty} |\Psi(\mathrm{x})|^2 dx,$$

так как $|\Psi(\mathrm{x})|^2$ – четная функция. Подставляя $\Psi(\mathrm{x})$ в эту формулу и вводя безразмерную переменную интегрирования $\xi = a^{1/2}x$, получаем:

$$\mathrm{W} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_1^{+\infty} \Theta^{-\xi^2} d\xi = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \cdot \int_0^1 \mathrm{e}^{-\xi^2} d\xi.$$

Получившийся интеграл можно вычислить только численно. Приближенно его можно найти, разложив экспоненту в ряд: $\exp(-\xi^2) = 1 - \xi^2 + \frac{\xi^4}{2} =$... Ограничившись этими тремя членами разложения, находим (с точностью примерно 10%) $\mathrm{W} \approx 1 - \frac{23}{18 \cdot \pi^{\frac{1}{2}}} = 0.14$.

Задача 3.9. В основном состоянии гармонического осциллятора найти распределение вероятностей различных значений импульса W_p, а также средние значения $< p >$ и $< p^2 >$.

Собственные функции оператора импульса $\hat{p} = -i\hbar \cdot \mathrm{d}/\mathrm{dx}$ имеют вид:

$$\varphi_p = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right).$$

Спектр собственных значений p оператора $\hat{p}$ сплошной: $-\infty < p < +\infty$. Разлагаем волновую функцию основного состояния гармонического осциллятора Ψ в интеграл по φ_p. Коэффициенты разложения 0_p имеют вид:

$$0_p = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(\mathrm{x}) \cdot \varphi_p^*(x) dx = (\frac{a}{\pi}) \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{ax^2}{2} - \frac{ipx}{\hbar}\right) dx.$$

Интеграл вычисляется путем приведения экспоненты к полному квадрату:

$$-\left(\frac{ax^2}{2} + \frac{ipx}{\hbar}\right) = -\frac{a}{2}\left(x + \frac{ip}{\hbar \mathrm{a}}\right)^2 - \frac{p^2}{2\hbar^2 a}$$

с последующей заменой переменной интегрирования:

$$\xi = \left(\frac{a}{2}\right)^{\frac{1}{2}} \left(x + \frac{ip}{\hbar \mathrm{a}}\right),$$

тогда

$$0_p = (\tau\hbar^2 a)^{-1/4} \exp\left(-\frac{p^2}{2\hbar^2 a}\right).$$

Искомое распределение вероятностей есть

$$\mathrm{W}_p = \left|0_p\right|^2 = (\pi\hbar^2 a)^{-1/2} \exp(-\frac{p^2}{\hbar^2 a}).$$

Можно проверить непосредственно, что $\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{W}_p dp = 1$, как и должно быть.

Вычислим средние значения:

$< p >= \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{W}_p \cdot p \cdot dp$ и $< p^2 >= \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{W}_p \cdot p^2 \cdot dp$.

Первый из этих интегралов равен нулю, ввиду нечетности подынтегральной функции. В интеграле для $< p^2 >$ используем полученное выражение для W и введем безразмерную переменную интегрирования:

$$\eta = \frac{p^2}{(\hbar^2 a)^{1/2}},$$

тогда

$$< p^2 >= \pi^{1/2} \hbar^2 a \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \eta^2 \cdot e^{-\eta^2} \cdot d\eta.$$

Такой интеграл равен $\pi^{1/2}/2$. Итак,

$$< p^2 >= \frac{\hbar^2 a}{2} = \frac{\hbar m\omega}{2}.$$

По порядку величины это значение можно было бы получить из соотношения неопределенностей.

Задача 3.10. Найти $< r^2 >$ и $< p^2 >$ в основном состоянии атома водорода.

Используем формулу для нахождения среднего значения оператора. $\hat{p}^2 = \hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2 = -\hbar^2\Delta$. В сферических координатах

$$< r^2 >= \int d\Omega \int_0^\infty r^2\, dr |\Psi|^2 r^2,$$

$$< p^2 >= -\hbar^2 \int d\Omega \int_0^\infty r^2\, dr \Psi^2 \Delta\Psi.$$

Здесь $\int d\Omega = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin\Theta\, d\Theta$ – интегрирование по углам φ и Θ, $\Psi = (\pi a_0^3)^{-1/2} e^{-r/a}$ – волновая функция основного состояния электрона в атоме водорода, $a_0 = \hbar^2/mc^2$ – боровский радиус. Поскольку в данном случае Ψ от углов не зависит, то интегрирование по углам дает 4π. По этой же причине угловая часть оператора Лапласа, действуя на Ψ, дает нуль, так что $\Delta\Psi = (1/\mathrm{r})(d^2/\mathrm{d}r^2)(\mathrm{r}\Psi)$. Вводя безразмерную переменную интегрирования $x = 2r/a$, получаем

$$< r^2 >= \frac{a_0^3}{8} \int_0^\infty x^4 e^{-x} dx,$$

$$< p^2 >= -\frac{2\hbar^2}{a_0^2} \int_0^\infty x\, e^{-x/2} \frac{d^2}{dx^2}\left(x e^{-x/2}\right) dx = \frac{2\hbar^2}{a_0^2} \int_0^\infty \left(\frac{d}{dx}\left(x e^{-x/2}\right)\right)^2 dx.$$

В последней формуле проинтегрировано по частям. Далее $\frac{d}{dx}\left(x e^{-\frac{x}{2}}\right) = (1 - x/a) e^{-x/2}$. Значения возникающих здесь интегралов даны в Приложении I. Окончательно находим

Ответ: $< r^2 >= 3a_0^2, < p^2 >= \hbar^2/a_0^2$.

Задача 3.11. Доказать, что для произвольных операторов $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}$ имеет место тождество $\left[\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}\right] = \hat{B}\left[\hat{A}, \hat{C}\right] + \left[\hat{A}, \hat{B}\right]\hat{C}$.

Задача 3.12. Собственные функции и собственные значения оператора $\hat{A}$ равны, соответственно, φ_n и a_n. Найти собственные функции и собственные значения оператора $(\hat{A})^k$.

Ответ: $\varphi_n, (a_n)^k$.

Задача 3.13. Вычислить коммутатор операторов кинетической $\hat{T}$ и потенциальной $\hat{U}$ энергий гармонического осциллятора. Указание: использовать тождество из задачи 3.2.

Ответ: $\left[\hat{T}, \hat{U}\right] = (\hbar\omega)^2/2$.

Задача 3.14. Доказать, что если $\hat{A}$ и $\hat{B}$ – эрмитовы операторы, то $[\hat{A},\hat{B}] = i\hat{C}$, где $\hat{C}$ – некоторый эрмитов оператор.

Задача 3.15. Даны собственные функции φ_n и собственные значения E_n гамильтониана системы $\widehat{H}$ и волновая функция системы $\Psi(0)$ при $t = 0$. Найти волновую функцию $\Psi(t)$ в последующие моменты времени. Указание: разложить искомую $\Psi(t)$ по φ_n и получить уравнение для зависимости коэффициентов разложения от времени с помощью нестационарного уравнения Шредингера.

Ответ: $\Psi(t) = \sum_n C_n e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} \varphi_n$, где $C_n = \int \Psi(0)\Psi_n^* \, dV$.

Задача 3.16. Найти производную по времени от оператора импульса для электрона в однородном электрическом поле $\vec{E}$.

Ответ: $\frac{d\hat{\vec{p}}}{dt} = -e\vec{E}$.

Задача 3.17. Доказать, что для изолированной системы взаимодействующих частиц суммарный импульс всех частиц является интегралом движения.

Задача 3.18. Вычислить $< x >, < x^2 >, < p >, < p^2 >$ в основном состоянии гармонического осциллятора, используя формулу для нахождения среднего значения.

Ответ: $< x > = < p > = 0, < x^2 > = 1/2a, < p^2 > = \hbar^2 a/2, a = m\omega/\hbar$.

Задача 3.19. Вычислить произведение $\Delta x \cdot \Delta p$ для n-го состояния частицы в яме с бесконечно высокими стенками.

Ответ: $\Delta x \cdot \Delta p = (\hbar/\mathrm{e}\sqrt{3})(\pi^2 n^2 - 6)^{1/2}$.

Задача 3.20. Найти распределение вероятностей различных значений импульса в основном состоянии частицы в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками.

Ответ: $W_p = \frac{4\pi a}{\hbar^2} \frac{\cos(pa/2\hbar)}{(\pi^2 - (pa/\hbar)^2)^2}$.

Задача 3.21. Найти распределение вероятностей импульса, $< x >, < x^2 >, < p >, < p^2 >$ для частицы, связанной в поле $U(x) = -a\delta(x)$.

Ответ: $W_p = \frac{2}{\pi} \frac{\hbar^3 \beta^3}{(p^2 + \hbar^2 p^2)^2}$, $< x > = < p > = 0, < x^2 > = 1/2\beta^2, < p^2 > = \hbar^2 p^2$.

Задача 3.22. Найти распределение вероятностей импульса в основном состоянии атома водорода.

Ответ: $W_p = \frac{8}{\pi^2} \cdot \frac{a_0^3}{\hbar^2} \frac{1}{(1 + p^2 a_0^2/\hbar^2)^4}$, $a_0 = \frac{\hbar^3}{me^2}$.

Задача 3.23. Найти вероятность того, что в основном состоянии атома водорода электрон находится в классически доступной области.

Ответ: $W = 13e^{-4} \approx 0.24$.

Задача 3.24. Вычислить $< p^2 >$ в основном состоянии атома водорода, используя результат задачи 3.18.

Задача 3.25. Вычислить средние значения кинетической $\hat{T}$ и потенциальной $\hat{U}$ энергий электрона в основном состоянии атома водорода.

Ответ: $< T >= me^4/2\hbar^2, < U >= -me^4/\hbar^2$.

Задача 3.26. То же для гармонического осциллятора.

Ответ: $< T >=< U >= \hbar\omega/4$.

Задача 3.27. Частица находится в поле $U(x) = -a\delta(x)$. При $t = 0$ волновая функция имеет вид $\Psi(x, 0) = a^{-1/2}e^{-|1|/a}$. Найти вероятность того, что при $t = \infty$ частица окажется в связанном состоянии.

Ответ: $W = \frac{4\beta a}{(1+\beta\alpha)^2}$.

Задача 3.28. Волновая функция гармонического осциллятора при $t = 0$ имеет вид $\Psi(x, 0) = \pi^{-1/4}a^{-1/2}e^{-x^2/2a^2}$. Найти вероятность того, что при $t = \infty$ осциллятор окажется в основном состоянии.

Ответ: $W = \frac{2a\sqrt{2}}{1+a^2a}$; $a = m\omega/\hbar$.

Задача 3.29. Волновая функция частицы в потенциальной яме шириной a с бесконечно высокими стенками имеет вид: $\Psi(x) = 1/\sqrt{a}$. Найти вероятность W_n того, что частица обладает энергией E_n.

Ответ: $W_n = \frac{8}{\pi^2 n^2}$ при нечетном n, $W_n = 0$ при четном n.

4. Простейшие примеры одномерного движения

В ряде случаев потенциальная энергия частицы зависит только от одной координаты (x). Тогда волновую функцию можно искать в виде произведения волновой функции $\sim\exp(i \cdot (p_y y + p_z z)/\hbar)$, отвечающей свободному движению в плоскости «yz», на функцию только от x. Стационарное уравнение Шредингера, описывающее одномерное движение частицы массы m в поле $U(x)$, имеет вид [9]:

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

Физический смысл имеют решения этого уравнения, для которых волновая функция Ψ и ее производная $d\Psi/dx$ непрерывны (если потенциальная энергия $U(x)$ нигде не обращается в бесконечность, то волновая функция $\Psi(\mathrm{x})$ и ее производная $d\Psi/\mathrm{dx}$ непрерывны). При этом для $\Psi(\mathrm{x})$ имеет место условие нормировки:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(\mathrm{x})|^2 \cdot dx = 1.$$

В точках, где потенциальная энергия обращается в бесконечность, производная $d\Psi/\mathrm{dx}$ может испытывать скачок.

Задача 4.1. Определить уровни энергии и соответствующие волновые функции частицы в потенциальной яме шириной a с бесконечно высокими стенками.

Пусть стенки расположены при $x = 0$ и $x = a$. В области $0 < x < a$, где $U = 0$, уравнение Шредингера

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

имеет вид

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + k^2 \cdot \Psi = 0,$$

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}.$$

Общее решение этого уравнения можно записать в двух эквивалентных формах:

$$\Psi = \mathrm{A} \cdot \sin(\mathrm{kx}) + \mathrm{B} \cdot \cos(\mathrm{kx})$$

или

$$\Psi = \mathrm{C} \cdot e^{ikx} + \mathrm{D} \cdot e^{-ikx},$$

где A, B, C и D – константы, подлежащие определению из граничных условий и условия нормировки. Вне ямы, очевидно, $\Psi = 0$. Тогда, из условия непрерывности Ψ следует, $\Psi(0) = \Psi(\mathrm{a}) = 0$. Если использовать первую из двух форм для записи Ψ, то $\Psi(0) = \mathrm{B} = 0$, $\Psi(\mathrm{a}) = \mathrm{A} \cdot \sin(\mathrm{ka}) = 0$. Отсюда $\mathrm{ka} = \mathrm{n}\pi$, где $\mathrm{n} = 1,2,3..$ (значение $\mathrm{n} = 0$ не годится, так как при этом $\Psi = 0$ и не выполняется условие нормировки). Выражая E через k, получаем уровни энергии:

$$E_n = \pi^2\hbar^2/2ma^2 \cdot n^2.$$

Соответствующие волновые функции имеют вид:

$$\Psi = \mathrm{A} \cdot \sin(\mathrm{n}\pi\mathrm{x}/\mathrm{a}).$$

Константа A определяется из условия нормировки. Так как при $x < 0$ и $x > a$ $\Psi = 0$ то

$$|A|^2 \cdot \int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \cdot dx = |A|^2 \cdot \frac{a}{2} = 1,$$

отсюда $A = (2/a)^{1/2}$ с точностью до произвольного фазового множителя вида $e^{i\varphi}$.

$\Psi_n = (2/\mathrm{a})^{1/2} \cdot \sin(\mathrm{n}\pi\mathrm{x}/\mathrm{a})$ (n=1,2,3).

Задача 4.2. Найти коэффициент отражения R от потенциальной стенки (рисунок 8): $U = 0$ при $x < 0$, $U = U_0$ при $x > 0$.

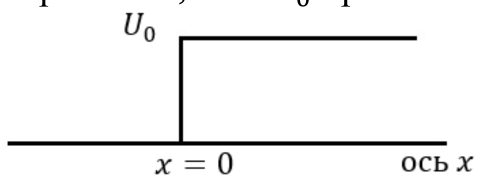


Рисунок 8 – Потенциальная стенка

Пусть энергия частицы равна E (E может быть как меньше, так и больше, чем U_0), а ее масса – m.

Во всей области $x > 0$ волновая функция имеет вид:

$$\Psi = A \cdot \exp(\mathrm{i}k_2\mathrm{x}),\ k_2 = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m \cdot (E - U_0)},$$

а в области $x < 0$ –

$$\Psi = \exp(\mathrm{i}k_1\mathrm{x}) + B \cdot \exp(-\mathrm{i}k_1\mathrm{x}),\ k_1 = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}.$$

Постоянные A и B определяются из условия непрерывности Ψ и $d\Psi/\mathrm{dx}$ при $\mathrm{x} = 0$:

$$1 + B = A, \qquad k_1 \cdot (1 - B) = k_2 \cdot A,$$

откуда

$$A = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}, \qquad B = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}.$$

Коэффициент отражения:

$$R = |B|^2 = 1 - \frac{k_2}{k_1} \cdot |A|^2 = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2 = \left(\frac{p_1 - p_2}{p_1 + p_2}\right)^2.$$

При $E = U_0$ $(k_2 = 0)$ коэффициент R обращается в единицу, а при $E \to \infty$ он стремится к нулю как $R = (U_0/4E)^2$.

Примечание: в предельном случае классической механики коэффициент отражения должен обратиться в нуль при $E > U_0$. Между тем, полученное выражение вовсе не содержит квантовой постоянной $\hbar$. Это кажущееся противоречие разъясняется следующим образом. Классическому пределу соответствует случай, когда дебройлевская длина волны частицы $\lambda \sim \hbar/p$ мала по сравнению с характеристическими размерами задачи, то есть с расстояниями, на которых заметно меняется потенциальная энергия $U(x)$. В рассматриваемой же задаче это расстояние строго равно нулю (скачок в точке $x = 0$), так что предельный переход не может быть произведен.

Задача 4.3. Найти коэффициент прохождения частицы через прямоугольный потенциальный барьер: $U = U_0$ при $0 < x < a$, $U = 0$ при $x < 0$ и $x > a$.

Пусть падающая частица массы движется слева направо. Тогда имеем для волновой функции в различных областях выражения вида:

при $x < 0$ $\quad \Psi = \Psi_1 = \exp(\mathrm{i}k_1\mathrm{x}) + A \cdot \exp(-\mathrm{i}k_1\mathrm{x}),$

при $0 < x < a$ $\quad \Psi = \Psi_2 = B \cdot \exp(\mathrm{i}k_2\mathrm{x}) + B^* \cdot \exp(-\mathrm{i}k_2\mathrm{x}),$

при $x > a$ $\quad \Psi = \Psi_3 = \mathrm{C} \cdot \exp(\mathrm{i}k_1\mathrm{x}),$

(со стороны $x > a$ должна быть только прошедшая волна, распространяющаяся в положительном направлении оси x). Постоянные A, B, B^*, C определяются из условий непрерывности Ψ и $d\Psi/\mathrm{dx}$ в точках $x = 0$ и $x = a$. Коэффициент прохождения определяется как

$$D = k_1|C|^2/k_1 = |C|^2 .$$

Вычисление приводит к результату:

$$D = \frac{4 \cdot k_1^2 \cdot k_2^2}{(k_1^2 - k_2^2)^2 \cdot \sin^2(a \cdot k_2) + 4 \cdot k_1^2 \cdot k_2^2}.$$

При $E < U_0$ k_2 – чисто мнимая величина; в полученном выражении k_2 можно заменить на $i\kappa_2$, где $\hbar\kappa_2 = \sqrt{2m \cdot (E - U_0)}$. После этого получается:

$$D = \frac{4 \cdot k_1^2 \cdot \kappa_2^2}{(k_1^2 + \kappa_2^2)^2 \cdot \mathrm{sh}^2(a \cdot \kappa_2) + 4 \cdot k_1^2 \cdot \kappa_2^2}.$$

Задача 4.4. Переписать точную формулу для коэффициента прохождения через простейший потенциальный барьер для случая $E > U_0$ (рисунок 9).

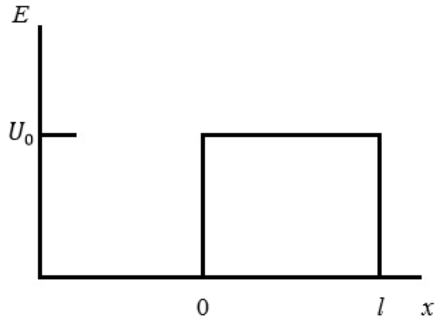


Рисунок 9 – Потенциальный барьер

Точная формула:

$$D = (1 + \frac{U_0^2 \cdot \mathrm{sh}^2(\kappa l)}{4E(U_0 - E)})^{-1},$$

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m \cdot (U_0 - E)}{\hbar^2}}.$$

Если $U_0 < E$, то κ – мнимая величина:

$$\kappa = i \cdot \varsigma = i \cdot \sqrt{\frac{2m \cdot (E - U_0)}{\hbar^2}}.$$

Тогда

$$D = (1 + \frac{U_0^2 \cdot \mathrm{sh}^2(i\varsigma l)}{4E(U_0 - E)})^{-1} = (1 + \frac{U_0^2 \cdot \sin^2(\varsigma l)}{4E(E - U_0)})^{-1},$$

поскольку $\sin(ia) = i\mathrm{sh}(a)$.

Из последней формулы для D видно, что при $E > U_0$ существуют такие значения энергии (E), что частица проходит через барьер, «не замечая» его ($D = 1$ строго). Эти значения определяются из условия: sin(ςl)=0, то есть $\sqrt{\frac{2m \cdot (E - U_0)}{\hbar^2}} \cdot l = n\pi$ (n – натуральное число).

Задача 4.5. Найти коэффициент отражения частицы от прямоугольной потенциальной ямы: $U = -U_0$ при $0 < x < a$, $U = 0$ при $x < 0$ и $x > a$.

Известна формула для коэффициента прохождения D_b через прямоугольный потенциальный барьер высотой $U_0 > 0$:

$$D_b = \frac{4 \cdot k^2 \kappa^2}{(k^2 + \kappa^2)^2 \cdot \mathrm{sh}^2(a \cdot \kappa) + 4 \cdot k^2 \cdot \kappa^2},$$

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2},$$

$$\kappa^2 = \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}.$$

Коэффициент прохождения D_w над потенциальной ямой можно записать точно так же, только следует везде заменить U_0 на $-U_0$. При выводе формулы для коэффициента прохождения через барьер нигде не учитывался знак величины U_0.

Для нахождения D_w учтем, что в яме κ становится чисто мнимой величиной и введем вместо κ

$$q^2 = -\kappa^2 = -\frac{2m(-U_0 - E)}{\hbar^2} = \frac{2m(U_0 + E)}{\hbar^2}.$$

Кроме этого, применим формулу:

$$\mathrm{sh}^2(\kappa a) = \mathrm{sh}^2(\pm iqa) = (\pm i)^2 \cdot \sin^2(qa).$$

Получается:

$$D_w = \frac{-4 \cdot k^2 q^2}{(k^2 - q^2)^2 \cdot (-\sin^2(\kappa a)) - 4 \cdot k^2 \cdot q^2} =$$

$$= \frac{4 \cdot k^2 q^2}{(k^2 - q^2)^2 \cdot \sin^2(\kappa a) + 4 \cdot k^2 \cdot q^2}.$$

Для нахождения коэффициента отражения от ямы R_w следует воспользоваться соотношением:

$$R_w = 1 - D_w = \frac{(k^2 - q^2)^2 \cdot \sin^2(\kappa a)}{(k^2 - q^2)^2 \cdot \sin^2(\kappa a) + 4 \cdot k^2 \cdot q^2} =$$

$$= \frac{\sin^2(\kappa a)}{\sin^2(\kappa a) + 4 \cdot k^2 \cdot q^2 / (k^2 - q^2)^2}.$$

Последнее слагаемое в знаменателе может быть упрощено:

$$\frac{4 \cdot k^2 \cdot q^2}{k^2 - q^2} = 4 \cdot \frac{E}{U_0} \cdot \left(\frac{E}{U_0} + 1\right),$$

после чего:

$$R_w = \frac{\sin^2(\kappa a)}{\sin^2(\kappa a) + 4 \cdot \frac{E}{U_0} \cdot (\frac{E}{U_0} + 1)}.$$

Задача 4.6. Частица массы m находится в одномерном потенциальном поле $U(x)$. Найти а) уравнение, определяющее возможные значения энергии частицы в области $E < U_0$; б) минимальное значение величины $l^2 U_0$, при котором появляется n-й энергетический уровень в области $E < U_0$ (рисунок 10).

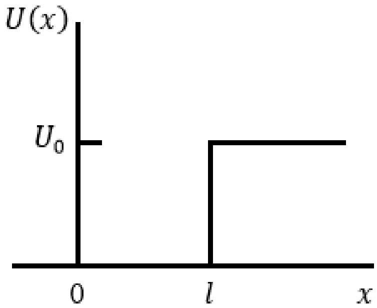


Рисунок 10 – Потенциальная стенка

Выпишем решение уравнения Шредингера

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

Для областей 1 ($0 < x < l$) и 2 ($x \geq l$), считая, что $E < U_0$:

$$\Psi_1 = A\cdot\sin\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\mathrm{x}+\mathrm{a}\cdot\cos\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x,$$

$$\Psi_2 = B\cdot e^{-\kappa x}+\mathrm{b}\cdot e^{\kappa x},$$

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

В точке $x = 0$ $\Psi(0) = 0$ – там бесконечный разрыв потенциала – поэтому $a = 0$. Из условия при $x \to +\infty$ (там Ψ должна быть ограниченной) получается $b = 0$.

Условия «сшивания» (условия непрерывности) в точке $x = l$ дают:

$$\begin{cases}\Psi_1(l)=\Psi_2(l),\\ \Psi'_1(l)=\Psi'_2(l).\end{cases}$$

$$\begin{cases}A\cdot\sin\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\mathrm{l}=\mathrm{B}e^{-\kappa l},\\ \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}A\cdot\cos\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}l=-\,\mathrm{B}\cdot\frac{\sqrt{2m(U_0-E)}}{\hbar}\cdot e^{-\kappa l}.\end{cases}$$

Разделим одно из получившихся уравнений на другое:

$$\frac{1}{\sqrt{2mE/\hbar}}\cdot\mathrm{tg}\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\mathrm{l}=-\frac{1}{\sqrt{2m(U_0-E)}/\hbar}\Rightarrow$$

$$\Rightarrow\mathrm{tg}\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\mathrm{l}=-\frac{\sqrt{E}}{\sqrt{U_0-E}}.$$

Решим (рисунок 11)

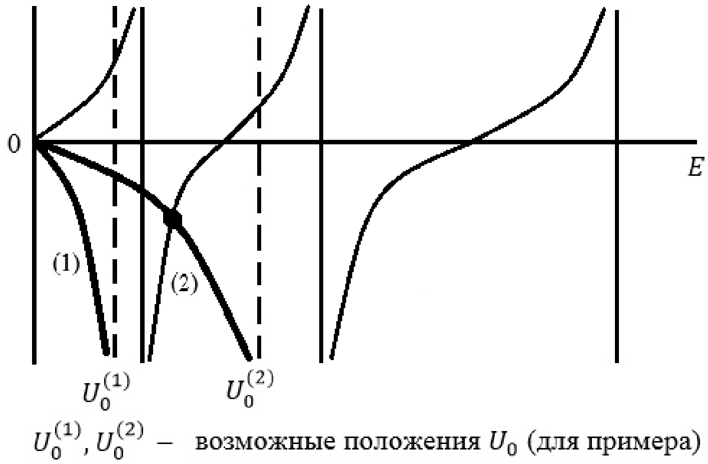


Рисунок 11 – Решение уравнения

Кривые «tg» расширяются с ростом E, поскольку аргумент не E, а $\sqrt{E}$.

Кривая «$-\frac{\sqrt{E}}{\sqrt{U_0-E}}$» начинается в нуле и заканчивается на «$-\infty$» при $E \to U_0$. Она может не иметь пересечений с кривыми «tg». Для примера на рисунке показаны случаи отсутствия пересечения и случай наличия ровно одной точки пересечения. Количество точек пересечения определяется величиной U_0.

Условие наличия n уровней – наличие n пересечений с кривыми «tg». Для этого, в свою очередь, необходимо наличие n пересечений с вертикальными линиями $E = \tilde{E}$, отвечающими разрывам «tg». n-й разрыв функции «tg» – это:

$$l\frac{\sqrt{2m\tilde{E}}}{\hbar} = (2n-1)\frac{\pi}{2} \Rightarrow \tilde{E} = \frac{(2n-1)^2\pi^2\hbar^2}{8ml^2}.$$

Чтобы существовало n уровней, должно быть $U_0 > \tilde{E}$ или:

$$U_0 l^2 > \frac{(2n-1)^2\pi^2\hbar^2}{8m}.$$

5. Потенциальные ямы и барьеры сложной формы

Как правило, каждая задача о движении частицы в поле, потенциал которого сложным образом зависит от координаты, требует специфического подхода.

«Сложность» формы ямы или барьера может заключаться, например:

– в существовании бесконечных разрывов потенциала (в этом случае требование непрерывности производной $d\Psi/\mathrm{d}x$ в точке разрыва U снимается и заменяется на иное требование, обсуждаемое в решениях; условие непрерывности самой Ψ сохраняется);

– в нетривиальности зависимости $U(x)$ $(U = U(x), U \neq U(y,z))$ (такие задачи решаются лишь численно, но для наиболее важных задач (гармонический осциллятор и др.) получены решения в виде специальных функций);

– в задании потенциала в недекартовой системе координат (для решения необходимо уметь записывать оператор Лапласа $\Delta\Psi$ в соответствующей системе координат, в частности, сферической:

$$\Delta\Psi = \frac{1^2}{r^2}\cdot\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\Psi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin(\Theta)}\cdot\left(\frac{\partial}{\partial\Theta}\left(\sin(\Theta)\cdot\frac{\partial\Psi}{\partial\Theta}\right)\right) + \frac{1}{r^2\sin^2(\Theta)}\cdot\frac{\partial^2\Psi}{\partial\varphi^2},$$

и цилиндрической:

$$\Delta\Psi = \frac{1}{r}\cdot\frac{\partial}{\partial r}\left(r\cdot\frac{\partial\Psi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\cdot\frac{\partial^2\Psi}{\partial\varphi^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2});$$

– в наличии квантовомеханического ограничения более чем по одной координате (в некоторых из таких задач удается произвести разделение переменных, представив Ψ, например, в виде $\Psi(\mathrm{x},\mathrm{y}) = \mathrm{X}(\mathrm{x})\cdot\mathrm{Y}(\mathrm{y})$) [9].

Задача 5.1. Найти энергетические уровни и волновые функции частицы массы m в потенциальной яме $U = -\alpha\delta(x)$ ($\alpha > 0$ – известная константа).

Пусть Ψ_1 – волновая функция частицы в полупространстве $\mathrm{x} \le 0$, которое мы будем называть «областью 1», а Ψ_2 – волновая функция в «области 2» – то есть в полупространстве $\mathrm{x} \ge 0$.

В областях 1 и 2 решения уравнения Шредингера имеют вид:

$$\Psi\colon \begin{cases} \Psi_1 = \mathrm{A}_1 e^{kx}, x < 0, \\ \Psi_2 = \mathrm{A}_2 e^{-kx}, x > 0. \end{cases}$$

$$k = \frac{\sqrt{2m(-E)}}{\hbar}.$$

При этом мы учитываем, что волновые функции не должны бесконечно возрастать при $x \to +\infty$ или $x \to -\infty$.

Из условия непрерывности волновой функции в нуле

$$\Psi_1 = \Psi_2 \text{ (при } x = 0)$$

получается, что

$$\mathrm{A}_1 = \mathrm{A}_2 = A.$$

Найдем граничные условия для производных Ψ'_1 и Ψ'_2 в точке $x = 0$. Для этого проинтегрируем уравнение Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\Psi'' - \alpha\delta(x)\cdot\Psi = E\cdot\Psi$$

вблизи $x = 0$ на интервале $(-\Delta,\ \Delta)$, а затем устремим Δ к нулю:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot(\Psi'_2(0) - \Psi'_1(0)) = \alpha\Psi_1(0)$$

(справа можно было написать и $\Psi_2(0)$, так как они равны).

Получилось:

$$\Psi'_2(0) - \Psi'_1(0) = -\frac{2m\alpha A}{\hbar^2},$$

то есть:

$$-kA-kA=-\frac{2maA}{\hbar^2}$$

(при этом использовано: $\Psi'_1=kAe^{kx},\Psi'_2=-kAe^{-kx}$),

$$k=\frac{ma}{\hbar^2}.$$

Соответственно,

$$E=-\frac{\hbar^2k^2}{2m}=-\frac{\hbar^2m^2a^2}{2m\hbar^4}=-\frac{ma^2}{2\hbar^2}.$$

Величина A определяется из условия нормировки:

$$1=\int_{-\infty}^{+\infty}|\Psi|^2dx=2\int_{0}^{+\infty}A^2e^{-2kx}dx=2A^2\frac{1}{2k}\Rightarrow A=k^{1/2}.$$

Волновую функцию Ψ можно записать, используя $|x|$ вместо x, то есть единым образом в областях 1 и 2:

$$\Psi=k^{1/2}\cdot e^{-k|x|}=\sqrt{\frac{ma}{\hbar^2}}\cdot\exp\left(-\frac{ma}{\hbar^2}|x|\right).$$

Получилось, что для ямы заданного вида существует только одно решение (ровно одно связанное состояние).

Ответ: $E=-ma^2/2\hbar^2$, $\Psi_0=\sqrt{\beta}e^{-\beta|x|}$, где $\beta=m\alpha/\hbar^2$.

Задача 5.2. Найти коэффициент отражения от потенциальной ямы вида $U=-\alpha\delta(x)$.

Можно рассмотреть сразу и задачу о яме ($\alpha>0$), и задачу о барьере ($\alpha<0$).

Пусть, для определенности, падающие частицы движутся в положительном направлении оси «x». Решение уравнения Шредингера, описывающее отражение таких частиц при $x<0$ и прохождение при $x>0$, есть:

$$\Psi_k=\begin{cases}e^{ikx}+A(\mathrm{k})e^{-ikx}, x<0,\\ B(k)e^{ikx}, x>0.\end{cases}$$

$$k=\sqrt{2mE/\hbar^2}.$$

Условия «сшивания» волновой функции в точке $x=0$:

$$\Psi'_k(+0)-\Psi'_k(-0)=-2ma/\hbar^2\cdot\Psi_k(0),$$

$$\Psi(+0)=\Psi(-0).$$

Из этих уравнений получаем:

$$1+A=B,$$

$$ik\cdot(B-1+A)=-2maB/\hbar^2.$$

Получается:

$$A(k)=\frac{-ma}{ik\hbar^2+ma},$$

$$B(k)=\frac{ik\hbar^2}{ik\hbar^2+ma}.$$

Коэффициент отражения $R(E)=|A|^2$, то есть:

$$R(E) = \frac{m^2a^2}{(m^2a^2 + k^2\hbar^4)}.$$

В частности, как и должно было быть, $R(E) \approx m^2a^2/k^2\hbar^4 = ma^2/2E\hbar^2 \to 0$ при $E \to +\infty$.

Задача 5.3. Найти связанные состояния частицы в поле $U(x) = -\alpha\delta(x + \text{a}) - \alpha\delta(x - \text{a})$.

Решения уравнения Шредингера (убывающие при $x \to \pm\infty$) для частицы с энергией $E < 0$ в рассматриваемом поле имеют вид:

$$\Psi(x) = \begin{cases} \exp\big(\kappa \cdot (x + \text{a})\big), x < -\text{a}, \\ A \cdot sh(\kappa x) + B \cdot ch(\kappa x), -\text{a} < x < +\text{a}, \\ C \cdot \exp\big(-\kappa \cdot (x - \text{a})\big), x > +\text{a}. \end{cases}$$

$$\kappa = \sqrt{2m \cdot (-E)/\hbar^2}.$$

При этом мы положили предэкспоненциальный множитель для Ψ в области $x <$ a равным единице (строго говоря, его следует положить равным некоторому числу S, которое определится из условия нормировки, но энергии связанных состояний можно найти и без предварительной нормировки $\Psi(x)$).

Условия «сшивания» $\Psi(x)$ для δ–функционного потенциала $U(x)$ имеет следующий вид:

$$\Psi'(x_0 + 0) - \Psi'(x_0 - 0) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2} \cdot \Psi(x_0),$$
$$\Psi(x_0 + 0) = \Psi(x_0 - 0),$$

где в качестве точек δ-разрыва (x_0) выступают $+$a и $-$a. В результате применения граничных условий в двух указанных точках получаем:

$$A \cdot sh(-\kappa \text{a}) + B \cdot ch(-\kappa \text{a}) = 1,$$
$$\kappa \cdot A \cdot ch(-\kappa \text{a}) + \kappa \cdot B \cdot sh(-\kappa \text{a}) - \kappa = -2m\alpha/\hbar^2,$$
$$A \cdot sh(\kappa \text{a}) + B \cdot ch(\kappa \text{a}) = C,$$
$$-C \cdot \kappa - \kappa \cdot A \cdot ch(\kappa \text{a}) - \kappa \cdot B \cdot sh(\kappa \text{a}) = -C \cdot 2m\alpha/\hbar^2.$$

Здесь четыре равенства для определения трех неизвестных (A, B, C). Ясно, что такая система разрешима не всегда, а только при определенных значениях κ, которые и предстоит найти.

Воспользуемся тем, что $sh(-\kappa \text{a}) = -sh(\kappa \text{a})$ и $ch(-\kappa \text{a}) = ch(\kappa \text{a})$, после чего вычтем из третьего равенства первое, а из второго – четвертое. После этого находим:

$$2 \cdot A \cdot sh(\kappa \text{a}) = C - 1,$$
$$\kappa \cdot 2A \cdot ch(\kappa \text{a}) + (C - 1) \cdot \kappa = (C - 1) \cdot 2m\alpha/\hbar^2.$$

Выражая из верхнего уравнения $(C - 1)$ и подставляя в нижнее, получаем, считая, что $A \neq 0$, следующее соотношение:

$$\kappa \cdot ch(\kappa \text{a}) + \kappa \cdot sh(\kappa \text{a}) = (2m\alpha/\hbar^2) \cdot sh(\kappa \text{a}).$$

Если воспользоваться выражением $ch(x)$ и $sh(x)$ через $\exp(x)$, то имеем в результате следующее трансцендентное уравнение:

$$\kappa = \frac{ma}{\hbar^2} \cdot (1 - \exp(-2\kappa a)), \text{где } \kappa = \sqrt{2m \cdot (-E)/\hbar^2}.$$

Выше мы считали, что $A \neq 0$. Случай $A = 0$ также нельзя игнорировать. Если $A = 0$, то сразу имеем $C = 1$ (из сопоставления первой и третьей строчек в записи условий «сшивания»). Следовательно,

$$A = 0 \Rightarrow B = 1/ch(\kappa\text{а}).$$

Второе и четвертное условия «сшивания» становятся идентичными, а именно (с учетом выражения для B):

$$\kappa \cdot \frac{1}{ch(\kappa\text{а})} \cdot sh(\kappa\text{а}) + \kappa = \frac{2ma}{\hbar^2}.$$

Снова используя представление $ch(x)$ и $sh(x)$ через exp, получаем:

$$\kappa = \frac{ma}{\hbar^2} \cdot (1 + \exp(-2\kappa\text{а})), \text{где } \kappa = \sqrt{2m \cdot (-E)/\hbar^2}.$$

Оказалось, что возможные связанные состояния характеризуются энергиями, определяемыми из соотношения:

$$\kappa = \frac{ma}{\hbar^2} \cdot (1 \pm \exp(-2\kappa\text{а})), \text{где } \kappa = \sqrt{2m \cdot (-E)/\hbar^2}.$$

Для знака (+) всегда имеется одно значение κ и, соответственно, одно значение E, в то время как для знака (–) решения может и не быть ($\kappa = 0$ не рассматривается) – это сразу становится понятным при попытке решить последнее уравнение графически. При графическом решении по горизонтальной оси следует откладывать κ. Для существования второго решения необходимо, чтобы при $\kappa = +0$ величина $\kappa \cdot \frac{\hbar^2}{ma}$ нарастала (как функция κ) медленнее, чем $1 - \exp(-2\kappa\text{а})$. Другими словами, производная по κ при $\kappa = +0$ от первого выражения должна быть меньше, чем от второго: получается, что для существования второго уровня энергии должно быть: $\frac{\hbar^2}{ma} < 2\text{а}$, то есть $2\text{а} \cdot m \cdot a/\hbar^2 > 1$.

Задача 5.4. Выписать осцилляторные функции Ψ_n до $n = 3$.

$$\Psi_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n!\, \pi^{1/2} l}} \cdot e^{-\frac{x^2}{2l^2}} \cdot H_n(\frac{\pi}{l}), \text{где}$$

$H_n\left(\frac{x}{l}\right) = H_n(\xi)$ – полином Эрмита, $l = (\frac{\hbar}{m\omega})^{1/2}$,

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{+\xi^2} \cdot \frac{d^{(n)}}{dx^n} e^{-\xi^2}.$$

Предварительно выпишем полиномы:

$$H_0(\xi) = 1,$$

$$H_1(\xi) = (-1)^1 e^{\xi^2} e^{-\xi^2} \cdot (-2\xi) = 2\xi,$$

$$H_2(\xi) = (-1)^2 e^{\xi^2} \left(e^{-\xi^2} \cdot 4\xi^2 - 2e^{-\xi^2}\right) = 4\xi^2 - 2,$$

$$H_3(\xi) = (-1)^3 e^{\xi^2} \left(e^{-\xi^2} \cdot (-8\xi^3) + e^{-\xi^2} \cdot 8\xi + 4\xi e^{-\xi^2}\right) = 8\xi^3 - 12\xi.$$

Учтем еще, что

$$n = 0: 2^n n! = 1,$$

$$n = 1\colon 2^n n! = 2,$$
$$n = 2\colon 2^n n! = 2^2 \cdot 2 = 8,$$
$$n = 3\colon 2^n n! = 2^3 \cdot 3! = 48.$$

Функции осциллятора:

$$\Psi_0 = \frac{1}{\sqrt{\pi^{1/2} l}} \cdot e^{-\frac{x^2}{2l^2}},$$

$$\Psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi^{1/2} l}} \cdot e^{-\frac{x^2}{2l^2}} \cdot \frac{2x}{l} = \sqrt{\frac{2}{\pi^{1/2} l}} \cdot e^{-\frac{x^2}{2l^2}} \cdot \frac{x}{l},$$

$$\Psi_2 = \frac{1}{\sqrt{8 \cdot \pi^{1/2} l}} \cdot e^{-\frac{x^2}{2l^2}} \cdot \left(4\frac{x^2}{l^2} - 2\right) = \frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi^{\frac{1}{2}} l}} \cdot e^{-\frac{x^2}{2l^2}} \cdot \left(2\frac{x^2}{l^2} - 1\right),$$

$$\Psi_3 = \frac{1}{\sqrt{48 \cdot \pi^{1/2} l}} \cdot e^{-\frac{x^2}{2l^2}} \cdot \left(8\frac{x^2}{l^2} - 12\right) = \frac{1}{\sqrt{8 \cdot \pi^{\frac{1}{2}} l}} \cdot e^{-\frac{x^2}{2l^2}} \cdot \left(2\frac{x^3}{l^3} - 3\frac{x}{l}\right).$$

Задача 5.5. Частица находится в двумерной прямоугольной потенциальной яме с абсолютно непроницаемыми стенками ($0 < x <$ a$, 0 < y < b$). Определить вероятность нахождения частицы с наименьшей энергией в области $0 < x <$ a$/3$.

Уравнение Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot (\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{d^2\Psi}{dy^2}) + U \cdot \Psi = E \cdot \Psi$$

(m – масса частицы) решается следующим образом: Ψ подставляется как

$$\Psi = \Psi_x(x) \cdot \Psi_y(x),$$

после чего получается:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \left(\frac{1}{\Psi_x}\frac{d^2\Psi_x}{dx^2}\right) - \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \left(\frac{1}{\Psi_y}\frac{d^2\Psi_y}{dy^2}\right) = E,$$

поскольку $U = 0$ в яме. Последнее равенство удовлетворяется лишь если:

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \left(\frac{1}{\Psi_x}\frac{d^2\Psi_x}{dx^2}\right) = E_x, \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \left(\frac{1}{\Psi_y}\frac{d^2\Psi_y}{dy^2}\right) = E_y. \end{cases}$$

(E_x, E_y – константы).

Отсюда, с учетом граничных условий

$$\Psi_x(0) = \Psi_x(\text{a}) = 0,$$
$$\Psi_y(0) = \Psi_y(b) = 0,$$

имеем:

$$\begin{cases} \Psi_x = A \cdot \sin\left(n_x \pi \dfrac{x}{\mathrm{a}}\right), \\ \Psi_y = B \cdot \sin\left(n_y \pi \dfrac{y}{b}\right), \end{cases}$$

где n_x, n_y – натуральные числа.

Значения констант A, B нас не интересуют в отдельности. Их произведение определяется из нормировки:

$$\int |\Psi|^2 dxdy = 1 \Rightarrow A^2B^2 \cdot \int_0^a \int_0^b \sin^2\left(n_x\pi\frac{x}{\mathrm{a}}\right) \cdot \sin^2\left(n_y\pi\frac{y}{b}\right) \cdot dxdy = 1 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow AB = \frac{2}{\sqrt{\mathrm{a}b}}.$$

Примечание. От координаты «z» ничего не зависит, поэтому вдоль оси «z» имеем плоскую волну: $\Psi = \Psi_x\Psi_y \cdot \exp(ik_z z)$ (k_z – любое). Можно считать, что по оси z функция Ψ нормирована «на единицу расстояния» (на размер «ящика» единичной длины, то есть $\int |\Psi|^2 dz = 1$). После того, как это оговорено, можно не выписывать экспоненциальный множитель.

Вероятность нахождения частицы с наименьшей энергией (то есть с $n_x = n_y = 1$) в области $0 < x < \mathrm{a}/3$ равна:

$$P = \int_0^{a/3} \int_0^b |\Psi|^2 dydx = \frac{2^2}{\mathrm{a}b} \cdot \int_0^{a/3} \sin^2\left(\pi\frac{x}{\mathrm{a}}\right) dx \cdot \frac{b}{2} =$$

$$= \frac{2}{\mathrm{a}} \cdot \int_0^{\frac{a}{3}} \frac{1}{2}\left(1 - \cos\left(2\pi\frac{x}{\mathrm{a}}\right)\right) dx = \frac{2}{a} \cdot \left(\frac{1}{2}\left(x - \frac{\sin\left(2\pi\frac{x}{\mathrm{a}}\right)}{\frac{2\pi}{\mathrm{a}}}\right)\Bigg|_0^{a/3}\right) =$$

$$= \frac{1}{\mathrm{a}}\left(\frac{\mathrm{a}}{3} - \frac{\sin\left(\frac{2\pi}{3}\right)}{2\pi}\mathrm{a}\right) = \frac{1}{3} - \frac{\sqrt{3}}{4\pi}.$$

Задача 5.6. Найти коэффициент отражения R от потенциальной стенки: $U = 0$ при $x < 0$, $U = U_0$ при $x > 0$. Указание: учесть различие в выражениях для плотности потока вероятности при $x < 0$ и при $x > 0$.

Ответ: При $E < U_0$ $R = 1$, при $E > U_0$ $R = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2$; $k_1 = (2mE/\hbar^2)^{1/2}$, $k_2 = (2m(E - U_0)/\hbar^2)^{1/2}$.

Задача 5.7. Найти коэффициент отражения от прямоугольной потенциальной ямы: $U = -U_0$ при $0 < x < a$, $U = 0$ при $x < 0$ и $x > a$. При каких энергиях частица проходит без отражения?

Ответ: $R = \frac{\sin^2 qa}{\sin^2 qa + \frac{4E}{U_0}\left(\frac{E}{U_0} + 1\right)}$; $q^2 = \frac{2m(E + U_0)}{\hbar^2}$.

Задача 5.8. Найти коэффициент прохождения частицы в поле $U(x) = -\alpha\delta(x+\text{a}) - \alpha\delta(x-\text{a})$. При каких условиях отражение отсутствует?

Ответ: $D = (1 + 4\text{tg}^2\delta(1+\text{tg}^2\delta)\cos^2(2ka+\delta))^{-1}$, где $\text{tg}\delta = \beta/k$, $\beta = ma/\hbar^2$, $k = (2mE/\hbar^2)^{1/2}$.

Задача 5.9. Найти уровни энергии частицы в поле: $U = \infty$ при $x < 0$, $U = kx^2/2$ при $x > 0$ (гармонический осциллятор, ограниченный потенциальной стенкой).

Ответ: $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$; $n = 1,3,5 \dots$.

Задача 5.10. В полубесконечном одномерном пространстве, ограниченном бесконечно высокой потенциальной стенкой: $U(x) = \infty$ при $x < 0$, $U(x) = 0$ при $x > 0$, в каждом состоянии с $E < E_0$ находится по одной частице. Состояния с $E > E_0$ не заполнены. Найти плотность частиц, как функцию расстояния до стенки $n(x)$.

Ответ: $n(x) = n_0(1 - \frac{\sin 2x_0x}{2k_0x})$; $n_0 = \frac{k_0}{2\pi}$, $k_0^2 = \frac{2mE_0}{\hbar^2}$.

Задача 5.11. Найти энергию связанного состояния в поле: $U(x) = \infty$ при $x < 0$, $U(x) = -\alpha\delta(x-\text{a})$ при $x > 0$. При каких значениях α существует связанное состояние?

Ответ: энергия определяется из трансцендентного уравнения $\kappa = \beta(1 - e^{-2\kappa a})$, где $\kappa^2 = -2mE/\hbar^2 > 0$, $\beta = ma/\hbar^2$. Связанное состояние существует при $a > 1/2\beta$.

6. Момент импульса. Поведение частицы в центральном поле. Атом водорода и многоэлектронные атомы

Оператор момента импульса частицы определяется как $\hat{\boldsymbol{l}} = [\hat{\boldsymbol{r}} \times \hat{\boldsymbol{p}}]$, то есть по аналогии с классической формулой. Каждая из проекций момента и квадрат момента также являются операторами. При изучении движения в центральном поле удобно представить $\hat{\boldsymbol{l}}$ в сферической системе координат; при этом, в частности,

$$\widehat{l_z} = -i\hbar \cdot \frac{\partial}{\partial\varphi} \text{ и } \widehat{l^2} = -\hbar^2 \cdot \frac{1}{\sin(\theta)} \cdot \left(\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\sin(\theta)\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\right)\right) + \frac{1}{\sin^2(\theta)}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\varphi^2}.$$

Имеют место коммутационные соотношения [9]:

$$[\widehat{l_x}, \widehat{l_y}] = i\widehat{l_z}, [\widehat{l_y}, \widehat{l_z}] = i\widehat{l_x}, [\widehat{l_z}, \widehat{l_x}] = i\widehat{l_y}.$$

Оператор квадрата момента $\hat{\boldsymbol{L}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$ коммутирует с любой проекцией момента

$$[\hat{\boldsymbol{L}}^2, \hat{L}_i] = 0.$$

Операторы $\hat{\boldsymbol{L}}^2$ и $\hat{L}_i$ имеют общие собственные функции – сферические функции $Y_{lm}(0,\varphi)$, причем

$$\hat{\boldsymbol{L}}^2 Y_{lm} = l(l+1)Y_{lm}; l = 0,1,2 \dots,$$
$$\hat{L}_i Y_{lm} = mY_{lm}; m - \text{целое число и} - l \le m \le l.$$

Отличные от нуля матричные элементы операторов $\hat{L}_i$ и $\hat{\boldsymbol{L}}$ в этом представлении имеют вид:

$$(l_m|L_x|l_{m-1}) = (l_{m-1}|L_x|l_m) = \frac{1}{2}\sqrt{(l+m)(l-m+1)},$$
$$(l_m|L_y|l_{m-1}) = (l_{m-1}|L_y|l_m) = -\frac{1}{2}\sqrt{(l+m)(l-m+1)}.$$

Операторы собственного углового момента частицы (спина) $\hat{S}_x$, $\hat{S}_y$, $\hat{S}_z$ удовлетворяют коммутационным соотношениям, однако их собственные значения могут быть и полуцелыми. Для случая спина ½ эти операторы можно записать с помощью матриц Паули $\hat{S} = \hat{\boldsymbol{\sigma}}/2$ [9]

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Собственными функциями оператора $\widehat{l^2}$ являются сферические функции $Y_{lm}(\theta, \varphi)$, а собственными значениями – величины $-\hbar^2 \cdot l(l+1)$, здесь l – целое число или ноль. Оператор l_z имеет те же собственные функции, но собственные значения $\hbar m$ $(m = 0, \pm 1, ., \pm l)$.

Если частица находится в центральном поле, то $U = U(r)$. В уравнении Шредингера искомая волновая функция Ψ подставляется в виде $\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot Y_{lm}(\theta, \varphi)$, после чего переменные разделяются и, с учетом того, что $l^2 Y_{lm} = -\hbar^2 \cdot l(l+1) \cdot Y_{lm}$, имеем для $R(r)$:

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

Решение, естественно, зависит от вида U. В частности, для электрона в атоме водорода (кулоновское поле) $U = -Qq/4\pi\varepsilon_0 r$ получается $R = R_{nl}(r)$, а значения энергии $E_n = -(Qq)^2 m/(2\hbar^2 n^2)/(4\pi\varepsilon_0)^2$. Аналитический вид R_{nl} обсуждается в задачах.

Для данного электрона n – натуральное число, $l = 0, .., n-1, m = 0, .., l$. Кроме того, электрон обладает спином $s = \pm 1/2$. Числа n, l, m, s называются квантовыми числами. Если электронов в атоме много, но их взаимодействие игнорируется, то энергия по-прежнему определяется значением главного квантового числа n. При этом уровни энергии E_n $2n^2$-кратно вырождены.

Однако, за счет спин-орбитального взаимодействия происходит снятие этого вырождения, и при данном значении n для минимизации энергии при «распределении» электронов по квантовым числам l и m следует руководствоваться определенными правилами или таблицами.

Формальные правила «распределения» электронов по квантовым числам (они не являются строгими, но во многих случаях на практике оказываются справедливыми, и их можно применять для решения задач):

1) Согласно принципу Паули, в устойчивом атоме не может быть более одного электрона с одинаковым набором n, l, m, s.

2) Если известны квантовые числа всех электронов в атоме, то квантовое число L всего атома определяется не как сумма l_i а – приблизительно – как модуль суммы m_i электронов: $L = |\sum m_i|$, что

связано с необходимостью сложения моментов как векторов. Если, например, один электрон имеет $l = 1, m = 0$, а другой $l = 1, m = 1$, то $L = 1$. Суммарное спиновое число $S = |\sum s_i|$.

3) Суммарное внутреннее квантовое число J атома изменяется в пределах от $|L - S|$ до $L + S$. В основном состоянии $J = |L - S|$, если имеется менее $2l + 1$ электронов с данными n и l, и $J = L + S$ в остальных случаях.

4) Полный механический момент атома M равен $\hbar \cdot (J(J+1))^{1/2}$.

5) Если дано n, то при увеличении числа электронов заполняется сначала $l = 0$, затем $l = 1$ и т.д.; для группы электронов с одним и тем же l нужно рассматривать только конфигурации, дающие максимальный S (правило Хунда); из последних конфигураций выбирается та, в которой L максимально.

6) Обозначения термов: ${}^{\kappa}(L)_J, \kappa = 2S + 1$ вместо (L) пишется: S при $L = 0, P(L = 1), D(L = 2), F(L = 3), G(L = 4), H(L = 5), I(L = 6)$.

Задача 6.1. Выписать в явном виде радиальные функции $X_{nl}(r)$ до $n = 4$ при всех l для частицы в кулоновском поле.

Общее выражение для X_{nl} имеет вид:

$$X_{nl} = (\frac{2}{n\text{a}})^{3/2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}} (\frac{2r}{n\text{a}})^l \cdot e^{-r/n\text{a}} L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{n\text{a}}\right),$$

$$\text{a} = \frac{\hbar^2}{mq^2} \cdot (4\pi\varepsilon_0),$$

$$L_k^s(x) = \frac{1}{k!} \cdot x^{-s} \cdot e^x \cdot \frac{d^{(k)}}{dx^k}(x^{s+k} \cdot e^{-x}).$$

Предварительно выпишем обобщенные многочлены Лаггера, соответствующие рассматриваемым n, l:

$$n = 4, l = 0 \quad L_3^1(x) = \frac{1}{3!} \cdot x^{-1} \cdot e^x \cdot \frac{d^{(3)}}{dx^3}(x^4 \cdot e^{-x}) =$$

$$= \frac{1}{6} x^{-1} e^x \frac{d^2}{dx^2}(4x^3 \cdot e^{-x} - x^4 \cdot e^{-x}) = \frac{1}{6} x^{-1} e^x \frac{d}{dx}(12x^2 e^{-x} - 4x^3 e^{-x} -$$

$$-4x^3 e^{-x} + x^4 e^{-x}) = \frac{1}{6} x^{-1} e^x \cdot (12 \cdot 2x e^{-x} - 12x^2 e^{-x} - 24x^2 e^{-x} +$$

$$+8x^3 e^{-x} + 4x^3 e^{-x} - x^4 e^{-x} = \frac{1}{6} x^{-1} e^{-x} \cdot (24x e^{-x} - 36x^2 e^{-x} + 12x^3 e^{-x} -$$

$$-x^4 e^{-x}) = 4 - 6x + 2x^2 - \frac{1}{6} x^3.$$

$$n = 4, l = 1 \quad L_2^3(x) = \frac{1}{2!} \cdot x^{-3} \cdot e^x \cdot \frac{d^2}{dx^2}(x^5 \cdot e^{-x}) =$$

$$= \frac{1}{2} x^{-3} e^x \frac{d}{dx}(5x^4 \cdot e^{-x} - x^5 \cdot e^{-x}) = \frac{1}{2} x^{-3} e^x (20x^3 e^{-x} - 5x^4 e^{-x} -$$

$$-5x^4e^{-x} + x^5e^{-x}) = 10 - 5x - \frac{1}{2}x^2.$$

$$n = 4, l = 2 \quad L_1^5(x) = \frac{1}{1!} \cdot x^{-5}e^x \frac{d}{dx}(x^6e^{-x}) = x^{-5}e^x(6x^5e^{-x} - x^6e^{-x}) = = 6 - x.$$

$$n = 4, l = 3 \quad L_0^7(x) = \frac{1}{0!}x^{-7}e^x \cdot x^7e^{-x} = 1.$$

$$n = 3, l = 0 \; L_2^1(x) = \frac{1}{2!}x^{-1}e^x \cdot \frac{d^2}{dx^2}(x^3e^{-x}) = \frac{1}{2}x^{-1}e^x \frac{d}{dx}(3x^2e^{-x} - x^3e^{-x}) =$$

$$= \frac{1}{2}x^{-1}e^x \cdot (6xe^{-x} - 3x^2e^{-x} - 3x^2e^{-x} + x^3e^{-x}) = 3 - 3x + \frac{1}{2}x^2.$$

$$n = 3, l = 1 \quad L_1^3(x) = \frac{1}{1!} \cdot x^{-3}e^x \frac{d}{dx}(x^4e^{-x}) = x^{-3}e^x(4x^3e^{-x} - x^4e^{-x}) = = 4 - x.$$

$$n = 3, l = 2 \quad L_0^5(x) = \frac{1}{0!}x^{-5}e^x \cdot x^5e^{-x} = 1.$$

$$n = 2, l = 0 \quad L_1^1(x) = \frac{1}{1!} \cdot x^{-1}e^x \frac{d}{dx}(x^2e^x) = x^{-1}e^x(2xe^{-x} - x^2e^{-x}) = = 2 - x.$$

$$n = 2, l = 1 \quad L_0^3(x) = \frac{1}{0!}x^{-3}e^x \cdot x^3e^{-x} = 1.$$

$$n = 1, l = 0 \quad L_0\,(x) = 1.$$

Теперь выпишем значения $\frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}$:

$n = 4, l = 3 \quad \frac{0!}{8 \cdot 7!} = \frac{1}{40320}$, $\qquad n = 3, n = 1 \quad \frac{0!}{6 \cdot 4!} = \frac{1}{144}$,

$n = 4, l = 2 \quad \frac{1!}{8 \cdot 6!} = \frac{1}{5760}$, $\qquad n = 3, l = 0 \quad \frac{0!}{6 \cdot 3!} = \frac{1}{18}$,

$n = 4, l = 1 \quad \frac{2!}{8 \cdot 5!} = \frac{1}{480}$, $\qquad n = 2, l = 0 \quad \frac{1!}{4 \cdot 2!} = \frac{1}{8}$,

$n = 4, l = 0 \quad \frac{3!}{8 \cdot 4!} = \frac{1}{32}$, $\qquad n = 2, l = 1 \quad \frac{0!}{4 \cdot 3!} = \frac{1}{24}$,

$n = 3, l = 2 \quad \frac{0!}{6 \cdot 5!} = \frac{1}{720}$, $\qquad n = 1, l = 0 \quad \frac{1!}{2 \cdot 1!} = \frac{1}{2}$.

Тогда для $X_{nl}(r)$ имеем:

$$X_{10} = (\frac{2}{\mathrm{a}})^{3/2}\sqrt{\frac{1}{2}}e^{-r/\mathrm{a}},$$

$$X_{20} = \left(\frac{1}{\mathrm{a}}\right)^{\frac{3}{2}}\sqrt{\frac{1}{8}}e^{-\frac{r}{2\mathrm{a}}}(2 - x), x = \frac{r}{\mathrm{a}},$$

$$X_{21} = \left(\frac{1}{\mathrm{a}}\right)^{\frac{3}{2}}\sqrt{\frac{1}{24}}e^{-\frac{r}{2\mathrm{a}}}\frac{r}{\mathrm{a}},$$

$$X_{30} = \left(\frac{2}{3\mathrm{a}}\right)^{\frac{3}{2}}\sqrt{\frac{1}{18}}e^{-\frac{r}{3\mathrm{a}}}\left(3 - 3x + \frac{1}{2}x^2\right), x = \frac{2r}{3\mathrm{a}},$$

$$X_{31} = \left(\frac{2}{3\mathrm{a}}\right)^{\frac{3}{2}}\sqrt{\frac{1}{144}}e^{-\frac{r}{3\mathrm{a}}}\left(\frac{2r}{3\mathrm{a}}\right)(4 - x), x = \frac{2r}{3\mathrm{a}},$$

$$X_{32} = \left(\frac{2}{3\mathrm{a}}\right)^{\frac{3}{2}}\sqrt{\frac{1}{120}}e^{-\frac{r}{3\mathrm{a}}}\left(\frac{2r}{3\mathrm{a}}\right),$$

$$X_{40} = \left(\frac{1}{2\mathrm{a}}\right)^{\frac{3}{2}}\sqrt{\frac{1}{32}}e^{-\frac{r}{4\mathrm{a}}}\left(4 - 6x + 2x^2 - \frac{1}{6}x^3\right), x = \frac{r}{2\mathrm{a}},$$

$$X_{41} = \left(\frac{1}{2\mathrm{a}}\right)^{\frac{3}{2}}\sqrt{\frac{1}{480}}e^{-\frac{r}{4\mathrm{a}}}\left(\frac{r}{2\mathrm{a}}\right)\left(10 - 5x + \frac{1}{2}x^2\right), x = \frac{r}{2\mathrm{a}},$$

$$X_{42} = \left(\frac{1}{2\mathrm{a}}\right)^{\frac{3}{2}}\sqrt{\frac{1}{5760}}e^{-\frac{r}{4\mathrm{a}}}\left(\frac{r}{2\mathrm{a}}\right)(6 - x), x = \frac{r}{2\mathrm{a}},$$

$$X_{43} = \left(\frac{1}{2\mathrm{a}}\right)^{\frac{3}{2}}\sqrt{\frac{1}{40320}}e^{-\frac{r}{4\mathrm{a}}}\left(\frac{r}{2\mathrm{a}}\right).$$

Задача 6.2. Выписать в явном виде сферические функции $Y_l^m(\theta, \varphi)$ при $l = 0,1,2,3$.

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{4\pi(l+|m|)!}} \cdot P_l^m \cos(\theta) \cdot e^{im\varphi},$$

где

$P_l^m(x) = (1 - x^2)^{|m|/2} \cdot \frac{d^{(|m|)}}{dx^{|m|}} P_l(x)$ – присоединенная функция Лежандра,

$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \cdot \frac{d^{(l)}}{dx^l}((x^2 - 1)^l)$ – «обычный» полином Лежандра.

Вначале выпишем «обычные» полиномы Лежандра до $l = 3$:

$$P_0(x) = 1,$$

$$P_1(x) = \frac{1}{2^1 1!} \cdot \frac{d}{dx}((x^2 - 1)^1) = x,$$

$$P_2(x) = \frac{1}{2^2 2!} \cdot \frac{d^{(2)}}{dx^2}((x^2 - 1)^2) = \frac{1}{8}\frac{d^{(2)}}{dx^2}(x^4 - 2x^2 + 1) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1),$$

$$P_3(x) = \frac{1}{2^3 3!} \cdot \frac{d^{(3)}}{dx^3}((x^2 - 1)^3) = \frac{1}{48}\frac{d^{(3)}}{dx^3}(x^6 - 3x^4 + 3x^2 - 1) =$$

$$= \frac{1}{48} \cdot (6 \cdot 5 \cdot 4 \cdot x^3 - 3 \cdot 4 \cdot 3 \cdot 2x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x).$$

Теперь можно получить присоединенные функции Лежандра:

$$P_0^0 = P_0 = 1,$$

$$P_1^0 = P_1 = x,$$

$$P_1^1 = (1 - x^2)^{1/2} \cdot 1 = (1 - x^2)^{\frac{1}{2}},$$

$$P_2^0 = P_2 = \frac{1}{2}(3x^2 - 1),$$

$$P_2^1 = (1 - x^2)^{1/2} \cdot \frac{1}{2} \cdot 6x = 3x(1 - x^2)^{\frac{1}{2}},$$

$$P_2^2 = (1 - x^2)^1 \cdot \frac{1}{2} \cdot 6 = 3(1 - x^2),$$

$$P_3^0 = P_3 = \frac{1}{2}(5x^3 - 3),$$

$$P_3^1 = (1 - x^2)^{1/2} \cdot \frac{1}{2} \cdot (5x^3 - 3),$$

$$P_3^2 = (1 - x^2)^1 \cdot \frac{1}{2} \cdot 30x = 15x(1 - x^2),$$

$$P_3^3 = 15(1 - x^2)^{3/2}.$$

Подготовим отдельно значения величин, стоящих в выражении для Y_l^m под корнем:

l	m		l	m	
3	0	$\frac{7 \cdot 3!}{4\pi \cdot 3!} = \frac{7}{4\pi}$	2	1	$\frac{5 \cdot 1!}{4\pi \cdot 3!} = \frac{5}{24\pi}$
3	1	$\frac{7 \cdot 2!}{4\pi \cdot 4!} = \frac{7}{48\pi}$	2	2	$\frac{5 \cdot 0!}{4\pi \cdot 4!} = \frac{5}{96\pi}$
3	2	$\frac{7 \cdot 1!}{4\pi \cdot 5!} = \frac{7}{480\pi}$	1	0	$\frac{3 \cdot 1!}{4\pi \cdot 1!} = \frac{3}{4\pi}$
3	3	$\frac{7 \cdot 0!}{4\pi \cdot 6!} = \frac{7}{2880\pi}$	1	1	$\frac{3 \cdot 0!}{4\pi \cdot 2!} = \frac{3}{8\pi}$
2	0	$\frac{5 \cdot 2!}{4\pi \cdot 2!} = \frac{5}{4\pi}$	0	0	$\frac{1}{4\pi} = \frac{1}{4\pi}$

Получились шаровые функции (учитывается, что $x = \cos(\theta)$, и что $\cos^2(\theta) = 1 - \sin^2(\theta)$):

$$Y_0^0 = \sqrt{\frac{1}{4\pi}},$$

$$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cdot \cos(\theta),$$

$$Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \cdot \frac{1}{2}(3\cos^2(\theta) - 1),$$

$$Y_3^0 = \sqrt{\frac{7}{4\pi}} \cdot \frac{1}{2}(5\cos^2(\theta) - 3\cos(\theta)),$$

$$Y_1^1 = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \cdot \sin(\theta) \cdot e^{i\varphi},$$

$$Y_2^1 = \sqrt{\frac{5}{24\pi}} \cdot 3\cos(\theta)\sin(\theta) \cdot e^{i\varphi},$$

$$Y_3^1 = \sqrt{\frac{7}{48\pi}} \cdot \frac{1}{2}\sin(\theta)\,(15\cos^2(\theta) - 3) \cdot e^{i\varphi},$$

$$Y_2^2 = \sqrt{\frac{5}{96\pi}} \cdot 3\sin^2(\theta) \cdot e^{2i\varphi},$$

$$Y_3^2 = \sqrt{\frac{7}{480\pi}} \cdot 15\cos(\theta)\sin^2(\theta) \cdot e^{2i\varphi},$$

$$Y_3^3 = \sqrt{\frac{3}{2880\pi}} \cdot 15\sin^3(\theta) \cdot e^{3i\varphi}.$$

Значения Y_l^{-m} получаются из Y_l^m изменением знака перед i.

Задача 6.3. Определить для атома водорода и иона He^+: энергию связи электрона в основном состоянии, потенциал ионизации, первый потенциал возбуждения и длину волны головной серии Лаймана.

Все решение проводится в системе СГС.

Из формулы Бальмера (R – константа Ридберга),

$$\omega = R \cdot Z^2 \cdot \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right),$$

ω – частота света, испущенного при переходе с уровня n_i на уровень n_f. Z – заряд ядра (в случае водорода $Z = 1$, гелия He^+ – $Z = 2$). «Головная» линия серии Лаймана – переход $n_i = 2 \Rightarrow n_f = 1$.

Получается, что

$$\omega = R \cdot Z^2 \cdot \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2}\right),$$

откуда

$$\lambda = \frac{2\pi c}{\omega} = \frac{8\pi}{3} \cdot \frac{c}{RZ^2}.$$

Энергия связи равна энергии за счет вращения вокруг ядра:

$$E_{\text{св}} = \frac{mv^2}{2} = \frac{mZ^2q^4}{2n^2\hbar^2} = \hbar Z^2 R,$$

($n = 1$: на первой орбите – основное состояние, $R = \frac{mq^4}{2\hbar^3}$).

Первый потенциал возбуждения равен изменению величины $E_{\text{св}}/q$ при переходе с первой орбиты на вторую:

$$\varphi_1 = \hbar Z^2 R \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2}\right) = \frac{3}{4}\hbar Z^2 R.$$

Потенциал ионизации – изменение величины $E_{\text{св}}/q$ при переходе с первой орбиты на бесконечность, то есть:

$$\varphi_i = \frac{E_{\text{св}}}{q}.$$

Данные по H и He^+ сведены в таблицу:

	$E_{\text{св}}$, эВ	φ_i, В	φ_1, В	λ, нм
H	13.6	13.6	10.2	121.5
He^+	54.5	54.5	40.8	30.4

Задача 6.4. Найти поправку к энергии электрона в основном состоянии атома водорода, если кулоновский потенциал заменить дебаевским (вместо $U(r) = -\frac{2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{q^2}{r}$ сделать $U(r) = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{q^2}{r}e^{-\kappa r}$), κ очень мало.

Волновая функция электрона в основном состоянии атома водорода имеет вид:

$$\Psi_0^{(0)} = \frac{2}{\text{a}^{3/2}} \cdot e^{-\frac{r}{\text{a}}}, \text{a} = 4\pi\varepsilon_0 \frac{\hbar^2}{mq^2}$$

(условие нормировки $\int_0^{+\infty} (\Psi_0^{(0)})^2 r^2 dr$; 4π сюда не входит).

Замену кулоновского потенциала на дебаевский можно трактовать как «добавление» к кулоновскому потенциалу возмущения V вида:

$$\text{V} = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{q^2}{r}e^{-\kappa r} + \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{q^2}{r}.$$

В первом порядке теории возмущений сдвиг уровня энергии будет равен:

$$\mathrm{E}_0^{(0)} = \int_0^{+\infty} \Psi_0^{(0)^*} \hat{\mathrm{V}} \Psi_0^{(0)} r^2 dr = \int_0^{+\infty} \frac{4}{\mathrm{a}^3} e^{-\frac{2r}{\mathrm{a}}} V r^2 dr =$$

$$= \frac{4}{\mathrm{a}^3} \int_0^{+\infty} e^{-\frac{2r}{\mathrm{a}}} \frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0} (-re^{-\kappa r} + r) dr =$$

$$= \frac{4q^2}{4\pi\varepsilon_0 \mathrm{a}^3} (-\int_0^{+\infty} re^{-\left(\frac{2}{\mathrm{a}}+\kappa\right)r} dr + \int_0^{+\infty} re^{-\left(\frac{2r}{\mathrm{a}}\right)} dr =$$

$$= \frac{4q^2}{4\pi\varepsilon_0 \mathrm{a}^3} (-\frac{1}{(\frac{2}{\mathrm{a}} + \kappa)^2} + \frac{1}{(2/\mathrm{a})^2}).$$

Далее используем то, что κ мало, точнее, что $\kappa\mathrm{a} \ll 1$:

$$\mathrm{E}_0^{(0)} = \frac{4q^2}{4\pi\varepsilon_0 \mathrm{a}^3} \left(-\frac{1}{\left(\frac{2}{\mathrm{a}}\right)^2 \left(1 + \frac{\kappa \mathrm{a}}{2}\right)^2} + \frac{1}{\left(\frac{2}{\mathrm{a}}\right)^2} \right) =$$

$$= \frac{4q^2}{4\pi\varepsilon_0 \mathrm{a}^3} \cdot \frac{\mathrm{a}^2}{4} \cdot \left(-\left(1 - 2\frac{\kappa \mathrm{a}}{2}\right) + 1 \right) = \frac{q^2 \kappa}{4\pi\varepsilon_0}.$$

Примечание. Использовано приближенное равенство: при $x \ll 1$ $\frac{1}{(1+x)^2} = (1+x)^{-2} \approx 1 - 2x$.

Задача 6.5. Найти максимально возможный полный механический момент и соответствующее спектральное обозначение терма атома а) натрия, валентный электрон которого имеет главное квантовое число $n = 4$; б) с электронной конфигурацией $1s^2 2p 3d$.

а) Считается, что состояние атома Na отличается от «обычного» состояния этого атома лишь тем, что $n = 4$ (вместо $n = 3$), а внутренние оболочки заполнены стандартно ($1s^2 2s^2 p^6$), то есть они не дают вклада в полный момент.

Таким образом, необходимо найти наибольший полный момент, создаваемый одним валентным электроном.

Так как электрон один, спиновое число:

$$S = 1/2.$$

Полный момент

$$M = \hbar\sqrt{J(J+1)},$$

где $J = L + S - k$ (k – ноль или натуральное число, но такое, чтобы $J \geq |L + S|$).

Наибольшее возможное значение L равно 3 (оно ограничено величиной $n - 1$). Ему соответствует спектральное обозначение терма F.

Соответственно,

$$J_{max} = 3 + \frac{1}{2} = \frac{7}{2},$$

при этом $k = 0$, а

$$M_{max} = \hbar\sqrt{\frac{7}{2}(\frac{7}{2}+1)} = \frac{3}{2}\sqrt{7}\hbar.$$

Обозначение терма ${}^2F_{7/2}$:

б) Указанная конфигурация соответствует атому с четырьмя электронами. Суммарное спиновое (S) и орбитальное (L) числа для этой конфигурации суть модули сумм спиновых s_i и магнитных m_i квантовых чисел этих электронов.

Часть конфигурации $1s^2$ не дает вклада ни в S, ни в L. Действительно, так как для этой части $n = 1$, то $l = 0$ для двух электронов. Поскольку речь идет об атоме и в нем не может быть двух электронов с одинаковым набором квантовых чисел, эти $1s -$ электроны различаются спинами (+1/2, –1/2), то есть их суммарный спин – ноль.

Величины S и L определяются, таким образом, $2p-$ и $3d-$ электронами; рассмотрим последние по отдельности.

$2p$:	$n = 2$	$3d$:	$n = 3$
	$l = 1$ (то есть $m = 0$ или ± 1)		$l = 2$ ($m = 0, \pm 1, \pm 2$)
	$s = \pm 1/2$ или –1/2		$s = \pm 1/2$ или –1/2

Наибольшее L достигается, если у $2p-$ электрона $m = 1$, а у $3d-$ электрона $m = 2$ (или, соответственно, –1 и –2); тогда $L = |\pm 1 \pm 2| = 3$ (спектральное обозначение терма будет F). Спиновое число S будет максимально, если спины $2p-$ и $3d-$ электронов одинаковы; при этом $S = 1$, а

$$J = L + S = 3 + 1 = 4$$

(это наибольшее возможное J, поскольку еще возможно $J = L + S - k, k = 0,1,2$ ..., вплоть до $J = |L - S|$).

Механический момент (наибольший):

$$M = \hbar\sqrt{J(J+1)} = \hbar\sqrt{4 \cdot 5} = \hbar 2\sqrt{5}.$$

Обозначение терма ${}^3F_4$.

Задача 6.6. Определить максимально возможный орбитальный механический момент атома в состоянии, мультиплетность которого равна 5, а кратность вырождения по J – семи. Написать спектральное обозначение соответствующего терма.

Мультиплетность – это величина $2S + 1$, так что $S = 2$.

Кратность вырождения по J всегда равна $2J + 1$. Из условия,

$$2J + 1 = 7,$$

откуда $J = 3$.

В задаче необходимо найти максимально возможное L. Известно, что J может быть равно:

$$J = L + S - k,$$
где $k = 0,1,2..$ но при этом $|L - S| \le J$.

Определим отсюда, чему вообще может равняться k (J и S у нас уже заданы):

$$3 = L + 2 - k \Rightarrow L = k + 1.$$

Должно быть:

$$|(k+1) - S| \le J, \text{то есть } |(k+1) - 2| \le 3.$$

Возведем это неравенство в квадрат:

$$k^2 + 1 - 2k \le 9 \Leftrightarrow k^2 - 2k - 8 \le 0 \Leftrightarrow$$

$$\leftrightarrow \frac{+2 - \sqrt{4+32}}{2} \le k \le \frac{+2 + \sqrt{4+32}}{2} \leftrightarrow -2 \le k \le 4.$$

Но при этом, естественно, k должно быть целым и неотрицательным, так что возможные значения k: $k = 0,1,2,3,4$. Поскольку $L = k + 1$, наибольшее L отвечает наибольшему k: конкретно $L = 5$ при $k = 4$.

Если $L = 5$, то спектральное обозначение терма $^5H_3$ (учтено, что $2S + 1 = 5$).

Полный орбитальный момент равен:

$$M_L = \hbar\sqrt{L(L+1)} = \hbar\sqrt{5 \cdot 6} = \hbar\sqrt{30}.$$

Задача 6.7. Найти возможные мультиплетности κ термов типа: а) $^\kappa D_2$ б) $^\kappa P_{3/2}$.

а) Символ терма «D» соответствует орбитальному числу $L = 2$. Поскольку справа внизу стоит «2», $J = 2$.

Мультиплетность – это величина $\kappa = 2S + 1$, то есть задача сводится к нахождению возможных значений S (спинового числа).

J может принимать значения:

$$J = L + S - k,$$

где k – натуральное число или ноль.

При этом должно быть

$$J \ge |L - S|.$$

Поскольку мы уже знаем значение J и L, получается

$$2 = 2 + S - k \text{ и при этом } 2 \ge |2 - S|.$$

Имеем:

$$S = k,$$
$$2 \ge |2 - k|.$$

После возведения в квадрат обеих частей неравенства

$$4 \ge 4 - 4k + k^2 \Leftrightarrow 0 \le k \le 4.$$

Но k – целое число (и, кроме того, $k \ge 0$), так что возможные значения k: $k = 0,1,2,3,4$.

Соответственно, возможные значения S такие же ($S = k$), а возможные значения мультиплетности $\kappa = 2S + 1$:

$$\kappa = 1,3,5,7,9.$$

б) Решение абсолютно аналогично п. а):

Терму «P» отвечает $L = 1$; из условия задачи также имеем $J = 3/2$. Как и в п.а) используем

$$\begin{cases} J = L + S - k, \text{где } k = 0,1,2 \dots, \\ \qquad\qquad J \geq |L - S|. \end{cases}$$

Подставив сюда J и L, имеем:

$$\frac{3}{2} = 1 + S - k \Rightarrow S = k + \frac{1}{2}.$$

$$|1 - (k + 1/2)| \leq 3/2 \Leftrightarrow \left|\frac{1}{2} - k\right| \leq 3/2,$$

$$\Rightarrow \frac{1}{4} + k^2 - k \leq \frac{9}{4} \Leftrightarrow k^2 - k - 2 \leq 0 \Rightarrow -1 \leq k \leq 2.$$

Поскольку $k = 0,1,2,3, \dots$, получаем возможные значения k: $k = 0,1,2$.

Соответственно, $S = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$ или $\frac{5}{2}$.

Мультиплетность ($\kappa = 2S + 1$): $\kappa = 2,4$ или 6.

Задача 6.8. В состоянии с заданными l и m найти среднее значение проекции момента на направление $\vec{n}$, имеющее полярные углы Θ_0 и φ_0.

Решение. Единичный вектор $\vec{n}$ имеет проекции $n_x = \sin\Theta_0 \cos\varphi_0$, $n_y = \sin\Theta_0 \sin\varphi_0$, $n_z = \cos\Theta_0$. Нужно найти $< \vec{L}\vec{n} >$. Имеем $< \vec{L}\vec{n} >= \int a\Omega Y_{lm}^* \hat{\vec{L}}\vec{n} Y_{lm} = \left(l_m\middle|\vec{L}\vec{n}\middle|l_m\right) = \left(l_m\middle|\hat{l}_x \sin\Theta_0 \cos\varphi_0 + \hat{l}_y \sin\Theta_0 \sin\varphi_0 + \hat{l}_z \cos\Theta_0\middle|l_m\right)$.

Операторы $\hat{l}_x$ и $\hat{l}_y$ не имеют диагональных матричных элементов, а $(l_m|L_z|l_m) = m$, поскольку Y_{lm} является собственной функцией $\hat{L}_z$, принадлежащей собственному значению m. Итак, $< \vec{L}\vec{n} >= m\cos\Theta_0$.

Ответ: $m\cos\Theta_0$.

Задача 6.9. Даны собственные функции z −проекции спина электрона $\chi_\pm$: $\hat{S}_z\chi_+ = (1/2)\chi_+, \hat{S}_z\chi_- = -(1/2)\chi_-$. найти собственные функции оператора $\hat{S}_x$.

Решение. Разложим искомые функции φ по функциям $\chi_\pm$:

$$\varphi = C_+\chi_+ + C_-\chi_-.$$

Коэффициенты C_+ и C_- определяются из условия, чтобы $\hat{S}_x\varphi = \lambda\varphi$. Получаем обычным образом уравнения для коэффициентов $C_\pm$:

$$(S_n)_{++}C_+ + (S_x)_{+-}C_- = \lambda C_+,$$
$$(S_n)_{-+}C_+ + (S_x)_{--}C_- = \lambda C_-.$$

Матричные элементы $(S_x)_{\alpha\beta}$ находим из формулы (15): $(S_x)_{++} = (S_x)_{--} = 0, (S_x)_{+-} = (S_x)_{-+} = 1/2$. Тогда уравнения для коэффициентов сводится к системе

$$\frac{1}{2}C_- = \lambda C_+, \frac{1}{2}C_+ = \lambda C_-.$$

Эта однородная система имеет ненулевое решение для коэффициентов $C_\pm$, только если $\lambda = \pm 1/2$. При $\lambda = +1/2$ из (18) имеем $C_- = C_+$. При этом из условия нормировки $|C_+|^2 + |C_-|^2 = 1$ с точностью до несуществующего фазового множителя следует: $C_+ = -C_- = 2^{-1/2}$ и $\varphi_- = 2^{-1/2}(\chi_+ - \chi_-)$. При аналогично.

Ответ: $\varphi_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_+ \pm \chi_-)$.

Задача 6.10. Гамильтониан системы из двух спинов ($S_1 = S_2 = 1/2$) имеет вид: $\hat{H} = A\hat{\vec{S}}_1\hat{\vec{S}}_2$. Найти уровни энергии.

Решение. Введем коммутирующий с гамильтонианом оператор полного спина $\hat{\vec{S}} = \hat{\vec{S}}_1 + \hat{\vec{S}}_2$. Поскольку $\vec{S}^2 = \vec{S}_1^2 + \vec{S}_2^2 + 2\hat{\vec{S}}_1\hat{\vec{S}}_2$, гамильтониан можно переписать в виде $\hat{H} = (A/2)(\hat{S}^2 - \hat{S}_1^2 - \hat{S}_2^2)$. Собственными функциями этого гамильтониана являются собственные функции $\Psi_{\pm m S_1 S_2}$операторов $\hat{S}^2, \hat{S}_2, \hat{S}_1^2, \hat{S}_2^2$. Собственные значения $\hat{H}$ (уровни энергии) получаются путем замены операторов $\hat{S}^2, \hat{S}_1^2, \hat{S}_2^2$ на их собственные значения: $S(S+1), (1/2)(1/2+1), (1/2)(1/2+1)$, соответственно. Итак, $E = (A/2)(S(S+1) - \frac{3}{2})$. Согласно правилу положения моментов, $S = 0{,}1$. Соответственно, $E_0 = -3A/4$ (синглетное состояние), $E_1 = A/4$ (триплетное состояние). При $S = 1$ значение m принимает три значения $0, \pm 1$. Однако значение энергии не зависит от m. Поэтому уровень E_1 трехкратно вырожден. Уровень E_0 не вырожден, поскольку при $s = 0$ число m принимает лишь одно значение $m = 0$.

Ответ: $E_0 = -3A/4$ (уровень не вырожден), $E_1 = A/4$ (уровень трехкратно вырожден).

Задача 6.11. Доказать соотношения $[\hat{l}_x, \hat{l}_y] = i\hat{l}_z$, $[\hat{l}_y, \hat{l}_z] = i\hat{l}_x$, $[\hat{l}_z, \hat{l}_x] = i\hat{l}_y$, используя определение $\hat{\vec{L}}$. Указание: использовать тождество из задачи 3.11.

Задача 6.12. Доказать соотношение $[\hat{\boldsymbol{L}}^2, \hat{L}_i] = 0$, используя формулы $[\hat{l}_x, \hat{l}_y] = i\hat{l}_z$, $[\hat{l}_y, \hat{l}_z] = i\hat{l}_x$, $[\hat{l}_z, \hat{l}_x] = i\hat{l}_y$.

Задача 6.13. Доказать, что $[\hat{L}^2, \hat{L}_2] = 0$, где $\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{L}}_1 + \hat{\vec{L}}_2$, исходя из того, что для компонент $\hat{\vec{L}}_1$ и $\hat{\vec{L}}_2$ справедливы соотношения $[\hat{l}_x, \hat{l}_y] = i\hat{l}_z$, $[\hat{l}_y, \hat{l}_z] = i\hat{l}_x$, $[\hat{l}_z, \hat{l}_x] = i\hat{l}_y$.

Задача 6.14. Вычислить коммутаторы $[\hat{L}_i, \hat{p}_x]$ и $[\hat{L}_i, \hat{x}_x]$.

Задача 6.15. Доказать, что угловой момент частицы в центральном поле является интегралом движения.

Задача 6.16. Используя вид матриц Паули, показать, что операторы проекций спина удовлетворяют коммутационным соотношениям $[\hat{l}_x, \hat{l}_y] = i\hat{l}_z$, $[\hat{l}_y, \hat{l}_z] = i\hat{l}_x$, $[\hat{l}_z, \hat{l}_x] = i\hat{l}_y$.

Задача 6.17. Вычислить собственные значения операторов $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$, используя вид матриц Паули.

Ответ: $\pm 1/2$.

Задача 6.18. Найти матрицу $\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2$.

Ответ: $\hat{S}^2 = \frac{3}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$.

Задача 6.19. Выразить собственные функции ψ_* оператора $\hat{S}$ через собственные функции $\chi_\pm$ оператора $\hat{S}_z$.

Ответ: $\psi_\pm = 2^{-\frac{1}{2}}(\chi_+ \pm i\chi_-)$.

Задача 6.20. В состоянии, в котором проекция спина электрона на ось z с достоверностью равна $1/2$, найти вероятности $W_\pm$ того, что проекция спина на ось x равна $\pm 1/2$.

Ответ: $W_+ = W_- = 1/2$.

Задача 6.21. Гамильтониан системы имеет вид $\hat{H} = \gamma \vec{H}\hat{\vec{L}}$, где $\hat{\vec{L}}$ – оператор момента, $\vec{H}$ – постоянный вектор, γ – коэффициент. Найти оператор $d\hat{\vec{L}}/dt$.

Ответ: $\frac{d\hat{\vec{L}}}{dt} = \gamma \vec{H} \times \hat{\vec{L}}$.

Задача 6.22. Гамильтониан, описывающий взаимодействие спина электрона с магнитным полем $\vec{H}$ имеет вид $\hat{H} = 2\mu_0 \hat{\vec{S}}\vec{H}$ (μ_0 – магнетон Бора). Пусть при $t = 0$ проекция спина на ось x с достоверностью равна $1/2$. Магнитное поле направлено вдоль оси z. Выразить волновую функцию в момент t через собственные функции $\chi_\pm$ оператора $\hat{S}_z$. Что означает полученный результат? Указание: использовать результаты задачи 6.9 и задач 3.15, 6.18.

Ответ: $\psi(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(e^{-i\Omega t/2}\chi_+ + e^{i\Omega t/2}\chi_-\right); \Omega = \frac{2\mu_0 H}{\hbar} = \frac{eH}{mc}$.

Задача 6.23. Гамильтониан взаимодействия спинов трех электронов имеет вид $\hat{H} = A(\hat{\vec{S}}_1\hat{\vec{S}}_2 + \hat{\vec{S}}_2\hat{\vec{S}}_3 + \hat{\vec{S}}_1\hat{\vec{S}}_3)$. Найти уровни энергии в кратности вырождения.

Ответ: $E = \pm 3A/4$, оба уровня четырехкратно вырождены.

Задача 6.24. Гамильтониан взаимодействия спинов двух электронов друг с другом и с магнитным полем $\vec{H}$ имеет вид $\hat{H} = A\vec{S}_1\vec{S}_2 + 2\mu_0\vec{H}(\vec{S}_1 + \vec{S}_2)$. Найти уровни энергии.

Ответ: $E_0 = -\frac{3A}{4}, E_{1m} = \frac{A}{4} + 2\mu_0 HM$, где $m = 0, \pm 1$.

Задача 6.25. Выразить собственные функции операторов полного спина $\hat{S}^2$ и $\hat{S}_2$ ($\hat{\vec{S}} = \hat{\vec{S}}_1 + \hat{\vec{S}}_2$) через собственные функции операторов $\hat{S}_1^2, \hat{S}_{12}$ и $\hat{S}_2^2, \hat{S}_{22}$для случая, когда $S_1 = S_2 = 1/2$.

Ответ: $\varphi_{11} = \chi_+^{(1)}\chi_+^{(2)}, \varphi_{1-1} = \chi_-^{(1)}\chi_-^{(2)}, \varphi_{10} = 2^{-\frac{1}{2}}\left(\chi_+^{(1)}\chi_-^{(2)} + \chi_-^{(1)}\chi_+^{(2)}\right)$; $\varphi_{00} = 2^{-\frac{1}{2}}\left(\chi_+^{(1)}\chi_-^{(2)} - \chi_-^{(1)}\chi_+^{(2)}\right)$.

Задача 6.26. Гамильтониан сверхтонкого взаимодействия спинов электрона $\hat{\vec{S}}$ и протона $\hat{L}$ в атоме водорода в присутствие магнитного поля имеет вид $\hat{H} = A\hat{\vec{S}}\hat{\vec{I}} + 2\mu_0\hat{\vec{H}}\hat{\vec{S}}$. Найти уровни энергии. Указание: вычислить матричные элементы $\hat{H}$ на собственных функциях $\hat{S}^2, \widehat{S_z}, \hat{I}^2, \widehat{I_z}$ (или на собственных функциях $\hat{F}^2, \widehat{F_z}, \hat{S}^2, \hat{I}^2, \widehat{I_z}$, где $\hat{\vec{F}} = \hat{\vec{S}} + \hat{\vec{I}}$) и диагонализировать получившуюся матрицу 4×4.

Ответ: $E_{1,2} = \frac{A}{4} \pm \mu_0 H, E_{3,4} = -\frac{A}{4} \pm \sqrt{\frac{A^2}{4} + (\mu_0 H)^2}$.

Задача 6.27. Плоский ротатор находится в состоянии с волновой функцией $\Phi(\varphi) = (\mathrm{a}/\sqrt{3\pi}\sin^2\varphi)$. Найти вероятности W_m того, что момент ротатора равен m.

Ответ: $W_0 = \frac{2}{3}, W_2 = W_{-2} = 1/6$.

7. Теория возмущений

Точное решение уравнения Шредингера может быть найдено только для некоторых простейших потенциальных полей, соответствующих идеализированным системам. При исследовании реальных систем приходится прибегать к приближенным методам решения уравнения Шредингера. Часто в условии задачи фигурируют величины разного порядка, а именно малые величины, после пренебрежения которыми задача упрощается настолько, что ее можно точно решить. Первый шаг в решении такой задачи состоит в точном решении упрощенной задачи, а второй – в приближенном вычислении поправок, обусловленных малыми членами, отброшенными в упрощенной задаче. В этом – суть метода теории возмущений [1].

В этом случае гамильтониан системы может быть представлен в виде:

$$\hat{H} = \widehat{H_0} + \hat{V},$$

где $\widehat{H_0}$ – невозмущенный гамильтониан, собственные функции Ψ_n и собственные значения E_n которого известны, а $\hat{V}$ – малая добавка – «возмущение».

а) Стационарная теория возмущений

Если возмущение V не зависит от времени, то собственные функции и собственные значения гамильтониана $\hat{H}$ мало отличаются от Ψ_n и E_n. В этом случае поправки к собственным функциям и собственным значениям $\widehat{H_0}$ могут быть найдены в виде разложения по степеням $\hat{V}$. Если собственное значение E_n невозмущенной системы не вырождено, то поправка первого порядка к энергии (она обозначается $E_n^{(1)}$) дается диагональным матричным элементом $\hat{V}$, вычисленным на невозмущенных функциях Ψ_n:

$$E_n^{(1)} = V_{nn} = \int \Psi_n^* \hat{V} \Psi_n dxdydz.$$

Рассмотрим теперь случай, когда уровень энергии E_n вырожден, то есть когда одному и тому же собственному значению энергии (E_n) отвечают две или более функций Ψ_{na} ($a = 1,2,..s$, s – кратность вырождения). В этом случае для нахождения поправок к энергии нельзя пользоваться приведенной выше формулой. Необходимо найти такие линейные комбинации функций Ψ_{na}

$$\Psi = \sum_G C_G \Psi_{nG},$$

чтобы матрица оператора $\hat{V}$, вычисленная на функциях Ψ, была диагональной. В рамках такой процедуры получаем систему s уравнений для определения поправки к энергии $E_n^{(1)}$:

$$\sum_\beta V_{na,n\beta} c_\beta = E_n^{(1)}\, c_a,$$

Следовательно, поправка определяется неоднозначно: s значений $E_n^{(1)}$ определяются как собственные значения матрицы $V_{na,n\beta}$:

$$\left\| V_{na,n\beta} - E_n^{(1)} \delta_{a\beta} \right\| = 0.$$

Метод теории возмущений применим, пока вычисленные поправки малы по сравнению с расстояниями между невозмущенными уровнями.

б) Нестационарная теория возмущений

Когда V зависит от времени, тогда речь идет о вероятностях переходов между состояниями невозмущенной системы под действием возмущения. Пусть в момент t_0 система находилась в состоянии n. Вероятность нахождения системы в момент t в состоянии $m \neq n$ в первом порядке теории возмущений определяется формулой:

$$W_{mn} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{t_0}^{t} dt' V_{mn}(t') \exp(i\omega_{mn} t') \right| \left(\omega_{mn} = \frac{E_m - E_n}{\hbar} \right).$$

Здесь V_{mn} – матричный элемент оператора $\hat{V}$, вычисленный на невозмущенных функциях, ω_{mn} – боровская частота перехода. Формула справедлива до тех пор, пока $W_{mn} \ll 1$.

Для случая, когда $\hat{V}$ гармонически зависит от времени $\hat{V}(t) = 2\hat{V}^{(n)} \cos \omega t$, вводят вероятность перехода в единицу времени:

$$W_{mn} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| V_{mn}^{(n)} \right|^2 \delta(E_m - E_n \pm \hbar\omega),$$

где знаки $\pm$ соответствуют переходам с увеличением $(+)$ и с уменьшением $(-)$ энергии.

Задача 7.1. Найти поправку к энергии основного состояния гармонического осциллятора, связанную с наличием возмущения $\hat{V} = \hat{p}x^4$.

Искомая поправка $E_n^{(1)}$ находится по формуле:

$$E_n^{(1)} = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \Psi_0^* \hat{V} \Psi_0 dx,$$

где Ψ_0 – «невозмущенная» волновая функция основного состояния осциллятора, которая, как известно, имеет следующий вид:

$$\Psi_0 = \frac{1}{\sqrt{\pi^{1/2} l}} e^{-x^2/2l^2}, \text{где } l = (\frac{\hbar}{m\omega})^{1/2},$$

m – масса частицы, ω – собственная частота осциллятора.

Вычисление $E_n^{(1)}$:

$$E_n^{(1)} = \frac{\beta}{\pi^{1/2} l} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} x^4 \exp(-x^2/l^2) dx = \frac{\beta}{\pi^{1/2} l} \cdot \frac{3l^2}{2} \cdot \frac{l^2}{2} \cdot (\pi l^2)^{\frac{1}{2}},$$

При этом использованы значение интеграла Пуассона и рекуррентная формула:

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^3} dx = (\frac{\pi}{a})^{1/2},$$

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} x^n e^{-ax^2} dx = \frac{n-1}{2a} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} x^{n-2} e^{-ax^2} dx.$$

Окончательный результат:

$$E_n^{(1)} = \frac{3}{4} \beta l^4 = \frac{3\beta}{4} (\frac{\hbar}{m\omega})^2.$$

Задача 7.2. Определить поправку к энергии связанного состояния частицы в поле $U(x) = -a\delta(x)$ при наличии возмущения $V(x) = \begin{cases} V_0, |x| < \text{a}, \\ 0, |x| > \text{a}. \end{cases}$

Волновая функция частицы в связанном состоянии в рассматриваемом поле имеет вид:

$$\Psi_0^{(0)^*} = (\frac{ma}{(h/2\pi)^2})^{1/2} \cdot \exp(-\frac{ma|x|}{(h/2\pi)^2}).$$

(Энергия этого состояния $E_0^{(0)}$).

В первом порядке теории возмущений поправка к энергии связанного состояния имеет вид:

$$E_0^{(0)} = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \Psi_0^{(0)^*} \hat{V} \Psi_0^{(0)} dx = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \left(\Psi_0^{(0)}\right)^2 V dx =$$

$$= 2\int\limits_0^a (\frac{ma}{(h/2\pi)^2}) \cdot \exp(-2\frac{max}{(h/2\pi)^2}) \cdot V_0 = V_0(1 - \exp(-2\frac{ma\text{a}}{(h/2\pi)^2})).$$

Задача 7.3. Определить поправку к энергии основного состояния осциллятора $E_0^{(0)}$, если возмущение имеет вид $V = \lambda x^3$, λ мало ($\lambda > 0$).

Волновая функция основного состояния осциллятора:

$$\Psi_0^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2^0 0!\, \pi^{\frac{1}{2}} l}} e^{-\frac{x^2}{2l^2}} H_0\left(\frac{x}{l}\right) = \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}} l^{\frac{1}{2}}} e^{-\frac{x^2}{2l^2}},$$

$$l = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}.$$

В первом порядке теории возмущений поправка к энергии этого состояния (без возмущения было $E_0^{(0)} = \frac{1}{2}\hbar\omega$):

$$E_0^{(1)} = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \Psi_0^{(0)*} \hat{V} \Psi_0^{(0)} dx = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \left(\Psi_0^{(0)}\right)^2 \lambda x^3 dx =$$

$$= \frac{\lambda}{\pi^{\frac{1}{2}} l} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} x^3 e^{-\frac{x^2}{2l^2}} dx = 0 \text{ (ввиду четности подынтегральной функции).}$$

В более высоких порядках теории возмущений поправка к энергии может, в принципе, стать отличной от нуля. Однако, как бы то ни было, возникает вопрос о смысле этих «поправок» (и поправок к волновым функциям), поскольку, сколь бы малым ни было λ, наличие возмущения λx^3 радикально изменяет асимптотический вид потенциальной энергии – настолько, что уравнение Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi'' + \frac{m\omega^2 x^2}{2}\Psi + \lambda x^3 \Psi = E\Psi$$

имеет непрерывный спектр.

На самом деле, если λ мало, то при численном решении уравнения Шредингера – при наличии члена $\lambda x^3 \Psi$ – получается, что если E близко к уровню E_n (в условии имеется в виду $n = 0$, но все это относится к любому уровню n), то величина $|\Psi|^2$ оказывается велика в области $x \approx 0$ и относительно мала при больших по модулю отрицательных x. Если же E значительно отличается от E_n, то решение $|\Psi|^2$, наоборот, таково, что $|\Psi|^2$ мало вблизи $x = 0$.

В любом случае такую волновую функцию $\Psi(x)$ уже нельзя нормировать, но, конечно же, можно говорить об областях, где $|\Psi|^2$ относительно мало или велико.

«Уровни» E_n, вычисляемые по теории возмущений, – «квазистационарные» (они реализуются, например, в ситуации с a–распадом (подробнее см. в книге Д.И. Блохинцева).

Вопрос о поведении Ψ при $x \to -\infty$ в значительной степени лишен смысла, поскольку нереальна такая асимптотика U при $x \to -\infty$. (На практике там «левее» некоторого x будет $U \approx const$)

Задача 7.4. В первом порядке теории возмущений определить сдвиг основного энергетического уровня атома водорода, возникающий благодаря влиянию отрицательного иона с зарядом $-q$, который расположен на расстоянии l от центра ядра атома водорода.

Возмущением в данном случае является потенциальная энергия электрона в поле иона, а именно:

$$\hat{V} = \frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{1}{|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{l}|},$$

здесь $\boldsymbol{l}$ – вектор, проведенный из точки, в которой находится протон (центр ядра, т.е. $\boldsymbol{r} = 0$), к иону. Поправка первого порядка дается формулой:

$$E^{(1)} = \int_0^{+\infty} \Psi_0^* \hat{V} \Psi_0 dV = \int_0^{+\infty} dV \cdot \frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{1}{|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{l}|} \cdot |\Psi_0|^2,$$

где Ψ_0 – волновая функция невозмущенного основного состояния электрона в атоме водорода.

Расчет по теории возмущений имеет смысл при $l \gg a_0$ (a_0 – первый боровский радиус), так как если $l \ll a_0$, то сдвиг уровня не будет малым по сравнению с энергией ионизации.

Основной вклад в интеграл дает область $r \ll a_0$, поскольку при $r \gg a_0$ волновая функция Ψ_0 экспоненциально мала. Поэтому можно пренебречь величиной r, по сравнению с l (в знаменателе). Тогда вычисление становится тривиальным, и, с использованием условия нормировки Ψ_0, мы имеем:

$$E^{(1)} = \frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{1}{l}.$$

Очевидно, что этот результат является чисто классическим и не зависит от конкретного вида функции Ψ_0.

Задача 7.5. Имеются два вырожденных уровня с волновыми функциями φ_1 и φ_2. Матричные элементы некоторого возмущения $\hat{V}$ между этими состояниями равны: $V_{11} = V_{22} = 0, V_{12} = V_{21} \neq 0$. Найти расщепление уровня и правильные волновые функции $\varphi_\pm$ нулевого приближения.

Появление расщепления при наличии возмущения связано с тем, что поправка $E^{(1)}$ к энергии вырожденного состояния определяется неоднозначно. Эта поправка находится при решении системы уравнений:

$$\left\| V_{\alpha\beta} - E^{(1)} \delta_{\alpha\beta} \right\| = 0.$$

Знак «‖ ‖» означает определитель; значки α, β пробегают значения от 1 до значения кратности вырождения (которая, по условию, равна 2). Отсюда определяются возможные значения $E^{(1)}$:

$$E^{(1)} = E_{\pm}^{(1)} = \pm|V_{21}|.$$

Волновую функцию ищем в виде:

$$\varphi = C_1\varphi_1 + C_2\varphi_2.$$

Коэффициенты C_1, C_2 удовлетворяют системе:

$$\sum_{\beta} V_{\alpha\beta}C_\beta = E^{(1)}C_\alpha,$$

которая в нашем случае записывается в виде:

$$V_{12}C_2 = E^{(1)}C_1,$$
$$V_{21}C_1 = E^{(1)}C_2.$$

Подставляя сюда значение $E^{(1)} = +|V_{21}|$, находим

$$C_2 = \frac{C_1V_{21}}{|V_{21}|}.$$

Условие нормировки $|C_1|^2 + |C_2|^2 = 1$ дает $C_1 = 2^{-1/2}$, так что

$$\varphi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\varphi_1 + \frac{V_{21}}{|V_{21}|}\varphi_2\right).$$

Аналогично может быть подставлено значение $E^{(1)} = -|V_{12}|$, тогда из нормировки получится

$$C_2 = -\frac{C_1V_{21}}{|V_{21}|}, C_1 = 2^{-\frac{1}{2}},$$
$$\varphi_- = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\varphi_1 - \frac{V_{21}}{|V_{21}|}\varphi_2\right).$$

Величина расщепления составляет $\Delta E = E_+^{(1)} - E_-^{(1)} = 2|V_{21}|$.

Задача 7.6. Потенциальная энергия частицы массы m зависит от координаты следующим образом: в области $\begin{cases}0 < x < L,\\ 0 < y < L,\end{cases}$ $U = 0$, а вне этой области $U = \infty$. По оси z движение свободно. Пусть энергия движения по оси z известна (E_z). Тогда уровень энергии $E_2^{(0)}$ двукратно вырожден. Найти сдвиг этого уровня за счет возмущения $\hat{V}$, имеющего вид: $\hat{V} = \left[\begin{array}{l} U_0 \text{ при } \begin{cases}0 < x < L/2,\\ 0 < y < L/2,\end{cases} \\ \quad 0 \text{ вовне.}\end{array}\right.$

Рассмотрим только движение в плоскости «*xy*». В невозмущенной системе волновые функции имеют вид:

$$\Psi^{(0)} = \frac{2}{L}\sin\left(\frac{n_x\pi x}{L}\right)\sin\left(\frac{n_y\pi y}{L}\right);\ n_x, n_y = 1,2,3\,..,$$

а уровни энергии:

$$E^{(0)} = \frac{\pi^2(h/2\pi)^2}{2mL^2}(n_x^2 + n_y^2).$$

Если бы мы учитывали и движение по z, то $\Psi^{(0)}$ следовало бы умножить на $\exp(ik_zz)$, а к $E^{(0)}$ добавить $+E_z$ (E_z у нас фиксировано). Далее мы не будем делать оговорок о движении по z.

Наинизший уровень ($E_1^{(0)}$) соответствует $n_x = n_y = 1$, и он не вырожден. Уровень энергии $E_2^{(0)} = \frac{\frac{5}{2}\pi^2\left(\frac{h}{2\pi}\right)^2}{mL^2}$ двукратно вырожден: ему соответствует как пара чисел $n_x = 1, n_y = 2$, так и пара $n_x = 2, n_y = 1$. Волновые функции, отвечающие энергии $E_2^{(0)}$, равны:

$$\Psi_{2,1}^{(0)} = \frac{2}{L}\sin(\frac{x\pi}{L})\sin\left(\frac{2\pi y}{L}\right),$$
$$\Psi_{2,2}^{(0)} = \frac{2}{L}\sin(\frac{2x\pi}{L})\sin\left(\frac{\pi y}{L}\right).$$

Значок $^{(0)}$ означает «в отсутствие возмущения»; первый нижний индекс у волновой функции нумерует невозмущенные уровни энергии (он равен 2, так как мы говорим об уровне $E_2^{(0)}$, а второй нижний индекс указывает на вырождение: он принимает значения 1 и 2, поскольку вырождение двукратное.

Для энергетического уровня ($E_2^{(0)}$) вычислим матричные элементы возмущения с этими функциями:

$$V_{11} = \int_0^L dx \int_0^L dy \Psi_{2,1}^{(0)} \hat{V} \Psi_{2,1}^{(0)} = \frac{4}{L^2} U_0 \int_0^{L/2} dx \int_0^{L/2} dy \sin^2\left(\frac{x\pi}{L}\right) \sin^2\left(\frac{2\pi y}{L}\right) =$$
$$= \frac{4U_0}{L^2} \int_0^{L/2} \frac{1-\cos\left(\frac{2x\pi}{L}\right)}{2} dx \int_0^{L/2} \frac{1-\cos\left(\frac{4y\pi}{L}\right)}{2} dy =$$
$$= \frac{4U_0}{L^2}\left(\frac{1}{2}x - \frac{\mathrm{L}\sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right)}{4\pi}\right)\Bigg|_0^{L/2} \cdot \left(\frac{1}{2}y - \frac{\mathrm{L}\sin\left(\frac{4\pi x}{L}\right)}{8\pi}\right)\Bigg|_0^{L/2} =$$
$$= \frac{4U_0}{L^2} \cdot \frac{L}{4} \cdot \frac{L}{4} = \frac{U_0}{4}.$$

$$V_{22} = \int_0^L dx \int_0^L dy\, \Psi_{2,2}^{(0)} \hat{V} \Psi_{2,2}^{(0)} = V_{11} = \frac{U_0}{4} \text{ (очевидно из симметрии).}$$

$$V_{12} = \int_0^L dx \int_0^L dy\, \Psi_{2,1}^{(0)} \hat{V} \Psi_{2,2}^{(0)} = \frac{4}{L^2} U_0 \int_0^{\frac{L}{2}} dx \int_0^{\frac{L}{2}} dy \sin\left(\frac{x\pi}{L}\right) \times$$
$$\times \sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{y\pi}{L}\right) \cdot \sin\left(\frac{2\pi y}{L}\right) = \text{(из симметрии)} =$$

$$= \frac{4}{L^2} U_0 \left(\int\limits_0^{\frac{L}{2}} dx \sin\left(\frac{x\pi}{L}\right) \sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right) \right)^2 = \frac{4}{L^2} U_0 \times$$

$$\times \left(\frac{1}{2} \int_0^{\frac{L}{2}} \left(\cos\left(\frac{x\pi}{L}\right) - \cos\left(\frac{3\pi x}{L}\right) \right) dx \right)^2 =$$

$$= \frac{U_0}{L^2} \left(\frac{\sin\left(\frac{x\pi}{L}\right)}{\frac{\pi}{L}} \Bigg|_0^{L/2} - \frac{\sin\left(\frac{3x\pi}{L}\right)}{\frac{3\pi}{L}} \Bigg|_0^{L/2} \right)^2 =$$

$$= \frac{U_0}{\pi^2} (\sin\left(\frac{\pi}{2}\right) - \frac{1}{3} \sin\left(\frac{3\pi}{2}\right))^2 = \frac{U_0}{\pi^2} (1 + \frac{1}{3})^2 = \frac{16}{9\pi^2} U_0.$$

Тогда находим сдвиг уровня:

$$E_2^{(1)} = \frac{V_{11} + V_{22} \pm \sqrt{(V_{11} - V_{22})^2 + 4V_{12}^2}}{2} =$$

$$= \frac{\frac{U_0}{4} + \frac{U_0}{4} \pm \sqrt{\left(\frac{U_0}{4} - \frac{U_0}{4}\right)^2 + 4\frac{16^2 {U_0}^2}{81\pi^4}}}{2} = \frac{U_0}{4} \pm \frac{16}{9\pi^2} U_0 = U_0 \left(\frac{1}{4} \pm \frac{16}{9\pi^2} \right).$$

Получилось, что сдвиг уровня определяется неоднозначно (из-за наличия знака $\pm$). Это означает, что происходит снятие вырождения.

Задача 7.7. На гармонический осциллятор (масса m, частота ω известны) с зарядом q, находящийся при $t = -\infty$ в основном состоянии, действует переменное однородное электрическое поле $\boldsymbol{E}(t) = \boldsymbol{E}_0 \cdot \exp(-t^2/\tau^2)$. В первом порядке теории возмущений найти вероятность перехода этого осциллятора в первое возбужденное состояние к моменту $t = +\infty$.

Добавка к потенциальной энергии осциллятора, связанная с наличием электрического поля («возмущение») имеет вид:

$$\hat{V} = -qE_0 x e^{-\frac{t^2}{\tau^2}}.$$

(При этом выполнено $-\frac{1}{q} \cdot \mathrm{grad}\hat{V} = \boldsymbol{E}$; ось x выбираем в направлении $\boldsymbol{E}_0$).

Отметим наличие минуса в выражении для $\hat{V}$. В известной задаче о движении электрона в атоме водорода при наличии электрического поля $\boldsymbol{E}$ в записи «возмущения» минус отсутствовал. Это связано с тем, что там под q понимается модуль заряда электрона (сам заряд отрицательный). В данной же задаче q – это сам заряд, и минус ставить надо.

Напишем волновые функции осциллятора в основном и первом возбужденном состояниях:

$$\Psi_0 = \frac{1}{\sqrt{\pi^{1/2} l}} e^{-x^2/2l^2}, l = (\frac{\hbar}{m\omega})^{1/2},$$
$$\Psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2\pi^{1/2} l}} e^{-x^2/2l^2} \cdot \frac{2x}{l}.$$

Вычислим матричный элемент перехода:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1 \hat{V}(t) \Psi_0 dx = - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi^{\frac{1}{2}} l}} e^{-\frac{x^2}{2l^2}} \cdot \frac{2x}{l} \cdot \left(qxE_0 e^{-\frac{t^2}{\tau^2}} \right) \cdot$$
$$\cdot \frac{1}{\sqrt{\pi^{\frac{1}{2}} l}} e^{-\frac{x^2}{2l^2}} = \frac{2^{\frac{1}{2}} qE_0}{\pi^{\frac{1}{2}} l^2} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-\frac{x^2}{l^2}} dx e^{-\frac{t^2}{\tau^2}} =$$
$$= - \frac{2^{\frac{1}{2}} qE_0}{\pi^{\frac{1}{2}} l^2} \cdot 2 \frac{\pi^{\frac{1}{2}}}{4} \left(\frac{1}{l^2} \right)^{-\frac{3}{2}} \cdot e^{-\frac{t^2}{\tau^2}} = - \frac{qE_0 l}{2^{\frac{1}{2}}} \cdot e^{-\frac{t^2}{\tau^2}}.$$

Вероятность перехода найдется как

$$W = \frac{1}{\left(\frac{h}{2\pi}\right)^2} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega t} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1 \hat{V}(t) \Psi_0 dx \right) dt \right|^2 =$$
$$= \frac{1}{\left(\frac{h}{2\pi}\right)^2} \left| - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{qE_0 l}{\sqrt{2}} e^{-\frac{t^2}{\tau^2} + i\omega t} dt \right|^2 = \frac{q^2 E_0^2 l^2}{2\left(\frac{h}{2\pi}\right)^2} \cdot$$
$$\cdot \left| \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{\left(t^2 - i\omega t\tau^2 + \frac{i^2\omega^2\tau^2}{4}\right)}{\tau^2}} dt \cdot e^{\frac{i^2\omega^2\tau^2}{4}} \right|^2 = \frac{q^2 E_0^2 l^2}{2\left(\frac{h}{2\pi}\right)^2} \cdot e^{\frac{-\omega^2\tau^2}{2}} \cdot$$
$$\cdot \left(\frac{1}{2} \cdot 2\sqrt{\pi} \sqrt{1/\tau^2}^{-1} \right)^2 = \frac{q^2 E_0^2 l^2}{2\left(\frac{h}{2\pi}\right)^2} \cdot e^{\frac{-\omega^2\tau^2}{2}} \cdot \pi \cdot \tau^2.$$

Подставляя сюда выражение для l (оно написано выше), получаем окончательный результат:

$$W = \frac{\pi}{2} \cdot \frac{q^2 E_0^2 \tau^2}{m\left(\frac{h}{2\pi}\right)\omega} \cdot e^{-\frac{\omega^2\tau^2}{2}}.$$

Задача 7.8. На атом водорода, находившийся при $t = -\infty$ в основном состоянии, действует переменное однородное электрическое поле $\vec{\mathrm{E}} = \overrightarrow{\mathrm{E}_0} e^{-|t|/\tau}$. Найти в первом порядке теории возмущений вероятность возбуждения атома в $2s -$ и в $2p -$состояниях.

Решение. Используем формулу для нахождения W_{mn}, в которой положим $t_0 = -\infty, t = \infty$. Оператором возмущения является потенциальная энергия электрона во внешнем электрическом поле $\hat{V} = e\vec{\mathrm{E}}\vec{r}$. Направим ось z вдоль $\vec{\mathrm{E}}$, тогда нам необходимо вычислить матричные элементы z между начальным и конечным состояниями. Ввиду одинаковой четности $1s - 2s$ —состояний $z_{1s,2s} = 0$, так что вероятность перехода в $2s$ —состояние равна нулю. Волновые функции в центральном поле имеют вид $\Psi_{nlm}(\vec{r}) - Y_{lm}(\Theta,\varphi)R_{nl}(r)$. Тогда, вычисляя матричный элемент $z = r\cos\Theta$ в сферических координатах, имеем

$$(100|z|21m) = \int a\Omega Y_{00}^{*}\cos\Theta Y_{1m}\int_0^\infty r^2 dr\, R_{10}R_{21}r.$$

Используя выражения для сферических и радиальных функций (Приложение I), находим, что интеграл по углам отличен от нуля при $m = 0$ и равен $\delta_{m0}/\sqrt{2}$, а интеграл по r равен $2^8 3^{-4}a_0/\sqrt{8}$. Таким образом, $V_{1s,2p} = 2^8 3^{-5} 2^{-1/2} e\mathrm{E}_0 a_0 e^{-|t|/\tau}$.

Вычислим теперь интеграл по времени в формуле для нахождения W_{mn}:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-\frac{|t|}{\tau}+i\omega t} = \frac{2\pi}{1+\omega^2\tau^2},$$

где ω – частота перехода. Окончательно находим

Ответ: $W_{2p,1s} = \frac{2^{17}}{3^{10}}\left(\frac{e\mathrm{E}_0 a_0\tau/\hbar}{1+\omega^2\tau^2}\right)^2$.

Задача 7.9. Найти поправку к энергии ионизации атома водорода, если кулоновский потенциал заменить дебаевским $U(r) = -\frac{e^2}{r}e^{-\varkappa^2}$.

Ответ: $E^{(1)} = e^2\varkappa$; $\varkappa a_0 \ll 1$.

Задача 7.10. Найти поправку к энергии ионизации атома водорода за счет конечных размеров ядра. Ядро считать сферой радиуса $r_0 \ll a_0$, равномерно заряженным по поверхности.

Ответ: $E^{(1)} = \frac{2}{3}\cdot\frac{e^2}{a_0}(\frac{r_0}{a_0})^2$.

Задача 7.11. Электрон, связанный с заряженным примесным центром в полупроводнике, похож на атом водорода. Однако эффективная масса может быть анизотропной. найти поправку к энергии ионизации центра, обусловленную малой анизотропной массы: $m_\parallel = m(1-\mathcal{E}), m_\perp = m(1+\mathcal{E})$, где $m_\parallel$ и $m_\perp$ – массы, определяющие движение вдоль некоторой оси кристалла и перпендикулярно ей.

Ответ: $\frac{E^{(1)}}{E_0} = -\mathcal{E}/3$.

Задача 7.12. Определить, насколько бы изменилась энергия ионизации атома водорода, если бы имелась малая поправка к закону Кулона: $\hat{V} = a/r^2$.

Ответ: $E^{(1)} = 2a/a_0^2$.

Задача 7.13. Определить поправку к энергии связанного состояния частицы в поле $U(x) = -a\delta(x)$ (см. задачу 5.1), обусловленную возмущением $V(x) = V_0$ при $|x| < a$, $V(x) = 0$ при $|x| > a$.

Ответ: $E^{(1)} = V_0\left(1 - e^{-2\beta a}\right); \beta = ma/\hbar^2$.

Задача 7.14. Определить поправку к энергии основного состояния трехмерного гармонического осциллятора за счет добавки к потенциальной энергии $\hat{V} = \beta r^4$.

Ответ: $E^{(1)} = \frac{15}{4}\beta(\frac{\hbar}{m\omega})^2$.

Задача 7.15. Определить поправку к энергии ионизации атома водорода, обусловленную релятивистской поправкой к кинетической энергии электрона. Указание: для вычисления $< p^2 >$ использовать результат задачи 3.22.

Ответ: $E^{(1)} = -\frac{5}{8}\frac{\hbar^4}{m^3c^2a_0^4} = -\frac{5}{4}(\frac{e^2}{\hbar c})^2 E_0$.

Задача 7.16. Решить в первом порядке теории возмущений задачу 6.25: а) при $\mu_0 H \ll A$ б) при $\mu_0 H \gg A$. Сравнить с точным ответом.

Задача 7.17. Найти величину расщепления уровня с $n = 2$ в атоме водорода, помещенном в однородное постоянное электрическое поле $\vec{E}$.

Ответ: $E_1^{(1)} = E_2^{(1)} = 0, E_{3,4}^{(1)} = \pm 2ea_0\mathcal{E}$.

Задача 7.18. Определить, каким было бы расщепление уровней $2s$ и $2p$ в атоме водорода, если бы потенциальная энергия электрона была бы не кулоновской, а дебаевской: $U(r) = -\frac{e^2}{r}e^{-\varkappa r}$ при $\varkappa a_0 \ll 1$.

Ответ: $\Delta E = e^2\varkappa^2 a_0/2$.

Задача 7.19. Найти уровни энергии системы спинов двух электронов с гамильтонианом $\hat{H} = A\hat{\vec{S}}_1\hat{\vec{S}}_2 + B\hat{S}_{12}\hat{S}_{34}$, рассматривая второй член как малое возмущение. Указание: использовать результаты примера 6.10 и задачи 6.25.

Ответ: $E_{00} = -\frac{3}{4}A - \frac{B}{4}, E_{10} = \frac{A}{4} - \frac{B}{4}, E_{11} = E_{1-1} = \frac{A}{4} + \frac{B}{4}$.

Задача 7.20. Спин электрона в магнитном поле $\vec{H}$, параллельном оси z, находится в состоянии $S_2 = -1/2$. Затем магнитное поле мгновенно поворачивается на малый угол Θ, остается в этом положении время τ, после чего мгновенно возвращается в первоначальное положение. В первом порядке теории возмущений найти вероятность перехода в состояние с $S_2 = 1/2$.

Ответ: $W = \Theta^2 \sin^2\frac{\Omega\tau}{2}; \Omega = \frac{2\mu_0 H}{\hbar} = \frac{eH}{mc}$.

Задача 7.21. На гармонический осциллятор с зарядом e, находившийся при $t = -\infty$ в основном состоянии, действует однородное переменное электрическое поле $\vec{E}(r) = \vec{E}_0 e^{-t^2/\tau^2}$. В первом порядке теории возмущений найти вероятность возбуждения осциллятора.

Ответ: $W = \frac{\pi}{2}\frac{(eE_0\tau)^2}{m\hbar\omega} e^{-(\omega\tau)^2/2}$.

Задача 7.22. На атом водорода, находившийся в $2s$ −состоянии, подействовал импульс электрического поля $\vec{E}$ длительностью τ. В первом порядке теории возмущений найти вероятность перехода в $2p$ −состояние.

Ответ: $W = (2eEa_0\tau/\hbar)^2$.

Задача 7.23. На плоский ротатор с моментом инерции I и дипольным моментом a, находившийся в основном состоянии, подействовал импульс электрического поля $\vec{E}$ длительностью τ. Найти вероятность возбуждения ротатора. (Поле $\vec{E}$ лежит в плоскости вращения ротатора).

Ответ: $W = 2(Ed/\hbar\Omega)^2 \sin^2\frac{\Omega\tau}{2}; \Omega = \hbar^2/2I$.

Задача 7.24. Электрон находится в однородном постоянном магнитном поле $\vec{H}$ на n −м уровне Ландау. Найти вероятность его перехода на $(n-1)$ −й уровень под действием импульса электрического поля $\vec{E} \perp \vec{H}$, имеющего зависимость от времени $\vec{E}(t) = E_0 e^{-|t|/\tau}$.

Ответ: $W = \frac{2n(eE_0\tau)^2}{m\hbar\omega}\frac{1}{(1+)^2}$.

8. Вариационный принцип

Вариационный метод применяется для приближенного определения энергии основного состояния и соответствующей волновой функции одной частицы в квантовой яме. Метод применим также для ситуации, когда в яме находится много взаимодействующих частиц, состояние которых приближенно описывается одной и той же волновой функцией [1].

Он состоит в том, что при условии $\int dV|\psi|^2 = 1$ величина

$$< E >= \int \psi^* \hat{H}\psi dV$$

минимальна, если $\psi = \psi_0$ – волновая функция основного состояния системы. При этом $< E >= E_0$. Если в качестве ψ выбрать любую другую нормированную функцию, то $< E >> E_0$. Таким образом, если вычислить интеграл $< E >= \int \psi^* \hat{H}\psi dV$ с некоторой функцией ψ, то мы получим некоторую верхнюю границу для энергии основного состояния. При удачном выборе ψ можно получить достаточно точное приближение для E_0.

Практически выбирают нормированную пробную функцию ψ, зависящую от одного или нескольких параметров a_1, a_2 .... Вычисляя интеграл $< E >= \int \psi^* \hat{H}\psi dV$, получаем $< E >$ как функцию этих параметров. Затем ищется минимум $< E >$ по отношению к этим параметрам, то есть решается система уравнений $\partial < E >/\partial a_i = 0$, откуда находят оптимальные значения параметров и соответствующее им наименьшее (для выбранного класса функций ψ) значение E.

Принимается, что волновая функция Ψ основного состояния имеет определенный простой аналитический вид (обычно его стараются подобрать, зная численно полученное точное решение). Вид («класс») пробных функций $\Psi(\boldsymbol{r}, a)$ задан для каждой задачи. Ψ зависит, помимо $\boldsymbol{r}$, от вариационного параметра a, который подлежит определению при минимизации средней энергии, приходящейся на одну частицу.

Алгоритм решения:

1) Домножением на константу (A), пронормировать функцию Ψ (если это предварительно не сделано); при этом A будет зависеть от a.

2) Используя пронормированную $\Psi(\boldsymbol{r}, a)$, определить средние значения потенциальной энергии $< U >$ и кинетической энергии $< T >$.

3) Если частиц много, вычислить среднюю энергию взаимодействия $< W >$ одной выбранной частицы с усредненным полем всех других частиц (так называемый метод Хартри).

4) Найти a при решении уравнения:

$$\frac{\partial}{\partial a}\left(< T > + < U > + \frac{1}{2} < W >\right) = 0,$$

(Множитель 1/2 позволяет избежать двукратного учета энергии межчастичных взаимодействий).

5) Получить энергию основного состояния частицы

$$< E > = < T > + < U > + < W >.$$

Если частица одна, слагаемое с $< W >$ отсутствует в обеих формулах.

Разумеется, достоверность решения задач вариационным методом сильно зависит от того, насколько удачно мы выбрали вид функции Ψ. При этом недостаток точности может быть скомпенсирован преимуществом в простоте результата. Среди различных классов пробных функций относительно лучшим является тот, который обеспечивает наименьшее значение энергии.

Задача 8.1. Найти вариационным методом энергию связанного состояния частицы в поле $U = -\alpha\delta(x)$. Пробная функция: $\Psi = A \cdot \exp(-x^2/\mathrm{a}^2)$, a – известная константа.

Из условия нормировки определим A:

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi|^2 dx = A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{2x^2}{\mathrm{a}^2}} dx = 2A^2 \int_{0}^{+\infty} e^{-\frac{2x^2}{\mathrm{a}^2}} dx =$$

$$= 2A^2 \frac{1}{2} \pi^{1/2} \cdot \left(\frac{2}{\mathrm{a}^2}\right)^{-\frac{1}{2}} = A^2 \pi^{\frac{1}{2}} \cdot \mathrm{a} \cdot 2^{-\frac{1}{2}} \Rightarrow A^2 = \frac{2^{\frac{1}{2}}}{\pi^{\frac{1}{2}} \cdot \mathrm{a}}.$$

Оператор $\hat{H}$ для частицы в данном поле имеет вид:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + (-\alpha\delta(x)).$$

Подлежит минимизации по параметру «a» следующая величина:

$$f = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \widehat{H} \Psi \mathrm{d}x = -\frac{\hbar^2}{2m} A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{x^2}{\mathrm{a}^2}} \cdot \left(e^{-\frac{x^2}{\mathrm{a}^2}}\right)''_{xx} dx -$$

$$-\alpha A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{x^2}{\mathrm{a}^2}} \cdot \delta(x) \cdot e^{-\frac{x^2}{\mathrm{a}^2}} dx =$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{x^2}{\mathrm{a}^2}} \cdot (e^{-\frac{x^2}{\mathrm{a}^2}} \cdot (-\frac{2x}{\mathrm{a}^2}))'_x \cdot dx - \alpha A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{2x^2}{\mathrm{a}^2}} \cdot \delta(x) \cdot dx =$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{x^2}{\mathrm{a}^2}} \cdot \left(e^{-\frac{x^2}{\mathrm{a}^2}} \cdot \left(-\frac{2x}{\mathrm{a}^2}\right)^2 - \frac{2}{\mathrm{a}^2} \cdot e^{-\frac{x^2}{\mathrm{a}^2}}\right) \cdot dx - \alpha A^2 =$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} A^2 \left(\frac{4 \cdot 2 \cdot \pi^{1/2}}{\mathrm{a}^4 \cdot 4} (\frac{2}{\mathrm{a}^2})^{-3/2} - \frac{2}{\mathrm{a}^2} \cdot \pi^{1/2} (\frac{2}{\mathrm{a}^2})^{-1/2}\right) - \alpha A^2 =$$

$$= -\frac{\hbar^2 \cdot 2^{\frac{1}{2}}}{2m \cdot \pi^{\frac{1}{2}} \cdot \mathrm{a}} \cdot \left(\frac{2\pi^{\frac{1}{2}}}{\mathrm{a} \cdot 2^{\frac{5}{2}}} - \frac{2\pi^{\frac{1}{2}} \cdot \mathrm{a}}{\mathrm{a}^2 \cdot 2^{\frac{1}{2}}}\right) - a \frac{2^{\frac{1}{2}}}{\pi^{\frac{1}{2}} \cdot \mathrm{a}} = \frac{\hbar^2}{2m\mathrm{a}^2} - \frac{a \cdot 2^{\frac{1}{2}}}{\pi^{\frac{1}{2}} \cdot \mathrm{a}}.$$

Минимизация f дает:

$$f'_{\mathrm{a}} = -\frac{\hbar^2}{m\mathrm{a}^3} + \frac{a \cdot 2^{\frac{1}{2}}}{\pi^{\frac{1}{2}} \cdot \mathrm{a}^2} = 0 \Rightarrow \mathrm{a} = \frac{\hbar^2 \cdot \pi^{\frac{1}{2}}}{m \cdot a \cdot 2^{\frac{1}{2}}}.$$

Энергия E – это f, соответствующее найденному а:

$$E = \left(\frac{1}{2} \cdot \frac{\hbar^2}{m\mathrm{a}^2} - \frac{a \cdot 2^{\frac{1}{2}}}{\pi^{\frac{1}{2}} \cdot \mathrm{a}}\right)_{\mathrm{a} = \frac{\hbar^2 \cdot \pi^{\frac{1}{2}}}{ma \cdot 2^{\frac{1}{2}}}} = \frac{1}{2} \frac{\hbar^2 m^2 a^2 \cdot 2}{m \hbar^4 \pi} -$$

$$- \frac{a \cdot 2^{\frac{1}{2}} \cdot ma \cdot 2^{\frac{1}{2}}}{\pi^{\frac{1}{2}} \cdot \hbar^2 \cdot \pi^{\frac{1}{2}}} = -\frac{ma^2}{\hbar^2 \pi}.$$

Точное решение для потенциала заданного вида (его можно получить отдельно): $E_{ex} = -\frac{1}{2} \cdot (ma^2)/\hbar^2$. Таким образом, применение вариационного метода с данным видом пробных волновых функций приводит к ошибке в $\pi/2$ раз. Истинное значение E_{ex} меньше, как и должно быть (при сопоставлении не следует забывать, что и E_{ex}, и E отрицательны).

Задача 8.2. Найти энергию основного состояния электрона в атоме водорода. Пробная функция $\Psi = \begin{cases} A \cdot \left(1 - \frac{r}{\mathrm{a}}\right), r < \mathrm{a}, \\ \quad 0, r \geq \mathrm{a}. \end{cases}$

Вычислим среднее значение энергии

$$\int_0^{+\infty} \Psi^* \widehat{H} \Psi r^2 dr = f$$

для данной волновой функции, предварительно пронормировав последнюю. После этого найдем минимум f как функции a. Это f и будет искомой энергией.

Для электрона в атоме водорода

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{1}{r}.$$

Условие нормировки функции Ψ:

$$1 = \int_0^{+\infty} |\Psi|^2 r^2 dr = A^2 \int_0^{+\infty} \left(1 - \frac{r}{a}\right)^2 r^2 dr = A^2 \int_0^{+\infty} \left(r^2 - \frac{2r^3}{a} + \frac{r^4}{a^2}\right)^2 dr =$$

$$= A^2\left(\frac{r^3}{3} - \frac{2r^4}{4a} + \frac{r^5}{5a^2}\right)\Bigg|_0^a = A^2 a^3\left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2} + \frac{1}{5}\right) = \frac{1}{30}A^2 a^3 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow A^2 = \frac{30}{a^3}.$$

Производная от Ψ (при $r <$ a):

$$\Psi_r' = -\frac{A}{\mathrm{a}},$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int_0^{+\infty} \Psi^* \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\Psi}{\partial r}\right) r^2 dr = -\frac{\hbar^2}{2m}\int_0^{+\infty} \Psi \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\Psi}{\partial r}\right) dr =$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\Psi r^2 \frac{\partial\Psi}{\partial r}\Bigg|_0^{+\infty} - \int_0^{+\infty} r^2\left(\frac{\partial\Psi}{\partial r}\right)^2 dr\right] = \frac{\hbar^2}{2m}\int_0^{+\infty} r^2\left(\frac{\partial\Psi}{\partial r}\right)^2 dr = \cdots.$$

Подставляя сюда Ψ_r', получаем:

$$\ldots = \frac{\hbar^2}{2m}\int_0^a r^2\frac{A^2}{\mathrm{a}^2} dr = \frac{\hbar^2 A^2 \mathrm{a}^3}{6m\mathrm{a}^2} = \frac{\hbar^2 \cdot 30\mathrm{a}^3}{6m\mathrm{a}^2\mathrm{a}^3} = \frac{5\hbar^2}{m\mathrm{a}^2}.$$

После этого вычислим среднее значение второго члена в $\widehat{H}$:

$$-\frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0}\int_0^a \frac{1}{r}A^2\left(1 - \frac{r}{a}\right)\cdot r^2 dr = -\frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0}A^2\left(\frac{r^2}{2} - \frac{2r^3}{3a} + \frac{r^4}{4a^2}\right)\Bigg|_0^a =$$

$$= \frac{q^2 A^2 a^2}{4\pi\varepsilon_0}\left(\frac{1}{2} - \frac{2}{3} + \frac{1}{4}\right) = -\frac{1}{12}\frac{q^2 A^2}{4\pi\varepsilon_0} = -\frac{q^2 \cdot 30a^2}{a^3(4\pi\varepsilon_0)\cdot 12} = -\frac{5}{2}\cdot\frac{q^2}{a\cdot 4\pi\varepsilon_0}.$$

Получилось, что

$f = \dfrac{5\hbar^2}{m\mathrm{a}^2} - \dfrac{5}{2}\cdot\dfrac{q^2}{\mathrm{a}\cdot 4\pi\varepsilon_0}$ – именно это и подлежит минимизациии.

$$\frac{\partial f}{\partial \mathrm{a}} = 5\left(-2\frac{\hbar^2}{m\mathrm{a}^2} + \frac{q^2\mathrm{a}}{2\mathrm{a}^3(4\pi\varepsilon_0)}\right) = 0 \Rightarrow \mathrm{a} = \frac{4\hbar^2(4\pi\varepsilon_0)}{mq^2},$$

$$E = \min(f) = \left[\frac{5\hbar^2}{m\mathrm{a}^2} - \frac{5}{2}\cdot\frac{q^2}{\mathrm{a}\cdot 4\pi\varepsilon_0}\right]_{\mathrm{a}=\frac{4\hbar^2(4\pi\varepsilon_0)}{mq^2}} =$$

$$= \frac{5\hbar^2 q^4 m^2}{m\cdot 16\hbar^4(4\pi\varepsilon_0)^2} - \frac{5q^2mq^2}{2\cdot(4\pi\varepsilon_0)\cdot 4\hbar^2(4\pi\varepsilon_0)} =$$

$$= \frac{mq^4}{2\hbar^2(4\pi\varepsilon_0)^2}\cdot\left(\frac{5}{8} - \frac{5}{4}\right) = \frac{5}{8}\cdot\left(-\frac{mq^4}{2\hbar^2(4\pi\varepsilon_0)^2}\right).$$

Выражение в скобках равно точному значению энергии основного состояния электрона в атоме водорода.

Задача 8.3. Найти с помощью вариационного принципа энергию основного состояния частицы в поле $\begin{cases} U(x) = \infty, x < 0, \\ U(x) = Fx, x > 0. \end{cases}$

Вид пробной функции: $\Psi = Ax\cdot\exp(-\alpha x)$. Величины $F(>0), a$ – известны.

Нормировка волновой функции заданного вида позволяет выразить A через a:

$$1 = \int\limits_0^{+\infty} A^2x^2\cdot e^{-2\alpha x}dx = A^2\frac{2!}{(2a)^{2+1}} = A^2\frac{2}{8a^3} = A^2\frac{1}{4a^3} \Rightarrow A^2 = 4a^3.$$

Среднее значение кинетической энергии:

$$< T >= -\frac{\hbar^2}{2m}\int\limits_0^{+\infty}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi \mathrm{d}x = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\Psi\frac{\partial}{\partial \mathrm{x}}\Psi\Big|_0^{+\infty} - \int\limits_0^{+\infty}(\frac{\partial\Psi}{\partial x})^2dx\right) =$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m}\int\limits_0^{+\infty}\left(\frac{\partial\Psi}{\partial x}\right)^2dx = \frac{\hbar^2}{2m}\int\limits_0^{+\infty}A^2(e^{-\alpha x} - \alpha x\cdot e^{-\alpha x})^2dx = \frac{\hbar^2\cdot 4a^3}{2m}\cdot$$

$$\cdot\int\limits_0^{+\infty}(e^{-2\alpha x} - 2\alpha x\cdot e^{-2\alpha x} + a^2x^2\cdot e^{-2\alpha x})dx = \frac{2\hbar^2a^3}{2m}\cdot(\frac{1}{2\alpha} - \frac{2a}{(2a)^2} +$$

$$+\frac{2a^2}{(2a)^3} = \frac{2\hbar^2a^3}{m}\cdot\frac{2a^2}{8a^3} = \frac{\hbar^2a^2}{2m}.$$

Среднее значение потенциальной энергии:

$$< U >= \int\limits_0^{+\infty}\Psi\cdot Fx\cdot\Psi \mathrm{dx} = \int\limits_0^{+\infty}FxA^2x^2\cdot e^{-2\alpha x}dx = FA^2\cdot$$

$$\cdot\int\limits_0^{+\infty}x^3\cdot e^{-2\alpha x}dx = F\cdot 4a^3\cdot\frac{3!}{(2a)^4} = \frac{6F}{4a} = \frac{3F}{2a}.$$

Минимизация (по параметру a) подлежит величина:

$$f = \langle T \rangle + \langle U \rangle = \frac{\hbar^2 a^2}{2m} + \frac{3F}{2a}.$$

$$\frac{\partial f}{\partial a} = \frac{2\hbar^2 a}{2m} - \frac{3F}{2a^2} = 0 \Rightarrow \frac{2\hbar^2 a}{2m} = \frac{3F}{2a^2} \Rightarrow a = \left(\frac{3Fm}{2\hbar^2}\right)^{\frac{1}{3}}.$$

Энергия основного состояния равна:

$$E = f(a)|_{a=(3mF/2\hbar^2)^{1/3}} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{3Fm}{2\hbar^2}\right)^{\frac{2}{3}} + \frac{3F(2\hbar^2)^{\frac{1}{3}}}{2(3mF)^{\frac{1}{3}}} =$$

$$= \frac{F^{\frac{2}{3}}\hbar^{\frac{2}{3}}}{m^{\frac{1}{3}}2^{\frac{1}{3}}} \cdot \left(\frac{3^{\frac{2}{3}}}{2 \cdot 2^{\frac{1}{3}}} + \frac{3 \cdot 2^{\frac{1}{3}}}{2^{\frac{2}{3}}3^{\frac{1}{3}}}\right) = \frac{F^{\frac{2}{3}}\hbar^{\frac{2}{3}}}{m^{\frac{1}{3}}2^{\frac{1}{3}}} \cdot \left(\frac{1 \cdot 3}{2 \cdot 2^{\frac{1}{3}} \cdot 3^{\frac{1}{3}}} + \right.$$

$$\left. + \frac{3 \cdot 2}{2 \cdot 2^{\frac{1}{3}} \cdot 3^{\frac{1}{3}}}\right)^{2/3} = \frac{F^{\frac{2}{3}}\hbar^{\frac{2}{3}}}{m^{\frac{1}{3}}2^{\frac{1}{3}}} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{9}{6^{\frac{1}{3}}}.$$

Примечание. Точное численное решение дает для этой задачи $E_{ex} \sim 2.34\left(\frac{\hbar^2 F^2}{2m}\right)^{1/3}$. В проведенном выше вариационном расчете коэффициент перед скобкой, возводимой в степень 3/2, есть $\frac{9}{2 \cdot 6^{\frac{1}{3}}} \approx 2.48$, то есть несколько больше, чем 2.34. Однако, как видим, точность высока.

Задача 8.4. С помощью вариационного принципа найти энергию основного состояния гармонического осциллятора, выбрав в качестве пробной функцию вида: $\Psi = A \cdot \exp(-\alpha|x|)$.

Если (независимо от этой задачи) знать точные волновые функции осциллятора, то можно сразу сказать, что предложен не очень удачный выбор вида пробной функции Ψ. Эта функция не имеет правильного асимптотического поведения при $x \to \pm\infty$. Однако, вариационный метод, естественно, применим и в этом случае.

Условие нормировки связывает A и a: $A = a^{1/2}$. Вычислим $\langle E \rangle$ по формуле:

$$\langle E \rangle = \int \Psi^* \hat{H} \Psi dx = \langle T \rangle + \langle U \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \cdot \frac{\hat{p}^2}{2m} \Psi \mathrm{dx} +$$

$$+ \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \cdot \frac{m\omega^2 x^2}{2} \Psi \mathrm{dx}.$$

При этом мы использовали явный вид выражения для гамильтониана гармонического осциллятора. Кроме того, $\hat{p} = -i\hbar d/dx$. После этого имеем:

$$\langle T \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \cdot \frac{d^2\Psi}{dx^2} dx = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \left|\frac{d\Psi}{dx}\right|^2 \mathrm{dx} = \frac{\hbar^2 a^2}{2m},$$

$$< U >= \frac{m\omega^2}{2} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi|^2 x^2 dx = \frac{m\omega^2}{4a^2}.$$

При непосредственном вычислении $< T >$ с выбранной функцией следует соблюдать осторожность: первая производная имеет разрыв при $x = 0$, а вторая производная в этой точке содержит поэтому член с δ–функцией. Можно обойти указанную трудность путем интегрирования по частям, что и сделано выше.

Итак, мы получили:

$$< E >= \frac{\hbar^2 a^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{4a^2}.$$

Найдем минимум этого выражения по параметру a, для чего решаем уравнение:

$$\frac{\partial < E >}{\partial a} = 0,$$

откуда имеем:

$$a^2 = \frac{m\omega}{\hbar\sqrt{2}} \text{ и } < E >= \frac{\hbar\omega}{\sqrt{2}}.$$

Сравнивая этот результат с точным ($E_0 = \hbar\omega/2$), видим, что полученное вариационным методом значение действительно больше, чем E_0 (как и должно быть). Однако, точность решения невысока ($\sim 40\%$), что связано с неудачным выбором пробной функции.

Задача 8.5. С помощью вариационного принципа найти величину a, входящую в выражение пробной функции $\begin{cases} \Psi = Axe^{-\alpha x}, A = (4a^3)^{1/2}, x > 0, \\ \Psi = 0, x < 0, \end{cases}$ частиц массы m в поле $\begin{cases} U(x) = \infty, x < 0, \\ U(x) = Fx, x > 0, \mathrm{F} > 0 - \text{известно}. \end{cases}$ Считать, что заряд каждой частицы q и что в яме находится N_s частиц на единицу площади вдоль плоскости xy. Использовать приближение Хартри.

Среднее значение потенциальной энергии в заданном поле:

$$< U >= \frac{3F}{2a}.$$

Среднее значение кинетической энергии:

$$< T >= \frac{(\hbar/2\pi)^2 a^2}{2m}.$$

Среднее значение энергии взаимодействия каждой частицы в яме с полем, создаваемым всеми остальными частицами:

$$< W >= \int_0^{+\infty} \Psi W(x) \Psi dx,$$

где $W(x) = \frac{q^2 N_s}{\varepsilon_0 \varepsilon}(-\frac{x}{2} + e^{-2\alpha x} \cdot \left(-\alpha x^2 - 2x - \frac{3}{2a}\right) + \frac{3}{2a})$

(это можно получить отдельно; ε – диэлектрическая проницаемость вещества, в котором создана квантовая яма).

$$< W >= \int_0^{+\infty} \frac{q^2 N_s}{\varepsilon_0 \varepsilon} (-\frac{x}{2} 4a^3 x^2 \cdot e^{-2\alpha x} - 4a^4 x^2 x^2 \cdot e^{-4\alpha x} - 2x^3 \cdot 4a^3 e^{-4\alpha x} -$$

$$-\frac{3}{2a} 4a^3 x^2 \cdot e^{-4\alpha x} + \frac{3}{2a} 4a^3 x^2 \cdot e^{-2\alpha x}) dx =$$

$$= \frac{q^2 N_s}{\varepsilon_0 \varepsilon} (-2a^3 \int_0^{+\infty} x^3 \cdot e^{-2\alpha x} dx - 4a^4 \int_0^{+\infty} x^4 \cdot e^{-4\alpha x} dx -$$

$$-8a^3 \int_0^{+\infty} x^3 \cdot e^{-4\alpha x} dx \cdot \int_0^{+\infty} x^2 e^{-4\alpha x} dx + 6a^2 \int_0^{+\infty} x^2 e^{-2\alpha x} dx) =$$

$$= \frac{q^2 N_s}{\varepsilon_0 \varepsilon} \left(-\frac{2a^3 \cdot 3!}{(2a)^4} - \frac{4a^4 \cdot 4!}{(4a)^5} - \frac{8a^3 \cdot 3!}{(4a)^4} - \frac{6a^2 \cdot 2!}{(4a)^3} + \frac{6a^2 \cdot 2!}{(2a)^3} \right) =$$

$$= \frac{q^2 N_s}{\varepsilon_0 \varepsilon a} \left(-\frac{6}{8} - \frac{6}{64} - \frac{12}{64} - \frac{12}{64} + \frac{12}{8} \right) = \frac{q^2 N_s}{\varepsilon_0 \varepsilon} \cdot \frac{9}{32a}.$$

Для вычисления a необходимо минимизировать величину

$$< U > + < T > + \frac{1}{2} < W >.$$

Чтобы избежать двукратного учета межчастичных взаимодействий, учтен множитель «1/2» перед $< W >$:

$$< U > + < T > + \frac{1}{2} < W >= \frac{3F}{2a} + \frac{\left(\frac{h}{2\pi}\right)^2 a^2}{2m} + \frac{q^2 N_s}{\varepsilon_0 \varepsilon} \cdot \frac{9}{64a} =$$

$$= \frac{\left(\frac{h}{2\pi}\right)^2 a^2}{2m} + \frac{1}{a} \left(\frac{3F}{2} + \frac{9 \cdot q^2 N_s}{64 \cdot \varepsilon_0 \varepsilon} \right).$$

Берем производную по a от последнего выражения и приравниваем ее нулю:

$$0 = \frac{\left(\frac{h}{2\pi}\right)^2 a^2}{2m} - \frac{1}{a^2} \left(\frac{3F}{2} + \frac{9 \cdot q^2 N_s}{64 \cdot \varepsilon_0 \varepsilon} \right).$$

Отсюда $a = (\frac{2m}{\left(\frac{h}{2\pi}\right)^2} \cdot \left[\frac{3F}{2} + \frac{9 \cdot q^2 N_s}{64 \cdot \varepsilon_0 \varepsilon}\right])^{1/3}$.

Примечание. Если требуется (после нахождения a) определить энергию основного состояния, то следует вычислять $< U > + < T > + < W >$, то есть уже без деления на 1/2.

Задача 8.6. С помощью вариационного принципа найти энергию основного состояния атома водорода, выбрав в качестве пробной функцию вида а) $\Psi = e^{-r^2/a^2}$, в) $\Psi = \mathrm{A}(1 - r^2/a^2)$ при $r < a$, $\Psi = 0$ при $r > a$. Какая из функций дает наилучшее приближение?

Ответ: а) $\frac{E}{E_0} = 8/3\pi \approx 0.85$ в) $\frac{E}{E_0} = 5^2 \cdot 7 \cdot 2^{-7} \cdot 3^{-1} \approx 0.46$ (Здесь $E, E_0 < 0$), поэтому из $\frac{E}{E_0} < 1$ следует $E > E_0$).

Задача 8.7. Найти с помощью вариационного принципа энергию основного состояния примесного центра в полупроводнике (см. задачу 7.11), не считая анизотропию массы малой. Взять пробную функцию в виде $\Psi = \mathrm{A}e^{-r/a}$. Сравнить с ответом к задаче 7.11, полученном по теории возмущений.

Ответ: $E = -\frac{\tilde{m}\tilde{e}^4}{2\hbar^2}; \frac{1}{\tilde{m}} = \frac{1}{3}\left(\frac{1}{m_\parallel} + \frac{2}{m_\perp}\right) = \frac{1}{m} \cdot \frac{1 - \frac{\varepsilon}{3}}{1 - \varepsilon^2}$; $\tilde{e}$ – эффективный заряд.

9. Квазиклассическое приближение.

Если дебройлевская длина волны мала по сравнению с характерным масштабом изменения потенциальной энергии $U(x)$, то свойства системы близки к классическим. В этом случае, как и в классической механике, можно ввести значение импульса $p(x)$ в точке x:

$$p(x) = \sqrt{2m \cdot \left(E - U(x)\right)}.$$

Такой метод описания квантовомеханических задач получил название квазиклассического приближения [1].

Область, где $E > U(x)$, называется классически допустимой областью движений. В этой области $p(x)$ – действительная функция. Значения x_i, при которых $E = U(x)$, называются точками поворота. Они соответствуют тем точкам пространства, в которых классическая частица останавливается ($p(x) = 0$), а затем движется обратно.

Уровни энергии частицы в квантовой яме в квазиклассическом приближении можно найти с помощью правила квантования Бора-Зоммерфельда:

$$\int_{x_i}^{x_j} p(x) \cdot dx = \pi\hbar \cdot \left(n + \frac{1}{2}\right),$$

где x_i и x_j – точки поворота, ограничивающие классически доступную область движения частицы в потенциальной яме при данной энергии E, n – целое число. Правило Бора-Зоммерфельда используется для определения энергии E при заданном значении n ($n \gg 1$).

Квазиклассическое приближение также может быть использовано для нахождения вероятности прохождения частиц через потенциальный барьер. В классически недоступной области ($E < U(x)$) импульс $p(x)$ чисто мнимый. Поэтому коэффициент прохождения D определяется (с точностью до предэкспоненциального множителя) выражением:

$$D \sim \exp\left(-\frac{2}{\hbar}\cdot\int\limits_{x_i}^{x_j}|p(x)|\cdot dx\right) = \exp\left(-\frac{2}{\hbar}\cdot\int\limits_{x_i}^{x_j}\sqrt{2m\cdot|E-U(x)|}\cdot dx\right),$$

где x_i и x_j –зависящие от значения E точки поворота. Формула применима при $D \ll 1$. Формула дает коэффициент прохождения D с точностью до предэкспоненциального множителя, слабо (по сравнению с экспонентой) зависящего от энергии и параметров барьера. Обратим внимание на то, что в формулах подынтегральные выражения обращаются в нуль на обоих пределах интегрирования.

Задача 9.1. Вычислить уровни энергии гармонического осциллятора в квазиклассическом приближении.

Потенциальная энергия:

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

Координаты точек поворота определяются из условия $E = U(x)$, откуда имеем:

$$x = \pm a, \text{ где } a^2 = 2E/m\omega^2.$$

По квазиклассической формуле для импульса получаем:

$$p(x) = \sqrt{2m\cdot(E - m\omega^2x^2/2)} = m\omega\cdot\sqrt{a^2 - x^2}$$

(удобно записывать величину $p(x)$ таким образом, чтобы сразу было очевидно, что она обращается в нуль в точках поворота).

Используем теперь правило квантования Бора-Зоммерфельда и найдем энергию:

$$\int\limits_{-a}^{+a} p(x)\cdot dx = \pi\hbar\cdot\left(n + \frac{1}{2}\right).$$

Вычислим левую часть данного равенства:

$$m\omega\cdot\int\limits_{-a}^{+a}\sqrt{a^2 - x^2}\cdot dx = m\omega\cdot 2a^2\cdot\int\limits_{0}^{1}\sqrt{1 - y^2}\cdot dy =$$

$$= m\omega\cdot 2a^2\cdot\int\limits_{0}^{1}\sqrt{1 - y^2}\cdot dy = m\omega\cdot 2a^2\cdot\int\limits_{0}^{\pi/2}\cos^2\varphi\cdot d\varphi =$$

$$= m\omega\cdot\frac{a^2}{2} = \frac{\pi E}{\omega}.$$

В процессе вычислений сделана замена переменной $\frac{x}{a} = y = \cos\varphi$.

Теперь имеем:

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

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

Формально этот результат совпадает с точным, но, строго говоря, в рамках квазиклассического подхода он может считаться обоснованным лишь для $n \gg 1$.

Задача 9.2. Найти уровни энергии в потенциальной яме: $U(x) = F \cdot |x|$ в рамках квазиклассического метода.

Пусть полная энергия частицы равна E. Тогда ее импульс, определяемый квазиклассически, равен

$$p(x) = \sqrt{2m \cdot (E - U(x))}.$$

Уровни энергии (т.е. возможные значения E) находятся из формулы Бора-Зоммерфельда:

$$\int_a^b p(x) \cdot dx = \pi\hbar \cdot \left(n + \frac{1}{2}\right),$$

где n – натуральное число (и $n \gg 1$), a и b – классические точки поворота – то есть значения x, при которых $p = 0$.

В данной задаче эти точки определяются следующим образом:

$$F \cdot |x| E = F \cdot |x| \Rightarrow x = \pm\frac{E}{F} \quad \left(a = -\frac{E}{F}, b = +\frac{E}{F}\right),$$

тогда

$$\int_a^b p(x) \cdot dx = 2 \cdot \int_0^b p(x) \cdot dx = 2 \cdot \int_0^b \sqrt{2m \cdot (E - F \cdot x)} \cdot dx =$$

$$= 2 \cdot \sqrt{2m \cdot F} \cdot \int_0^b \left(\frac{E}{F} - x\right)^{\frac{1}{2}} dx = \frac{4}{3} \cdot \sqrt{2m \cdot F} \cdot \frac{E^{\frac{3}{2}}}{F^{\frac{3}{2}}} = \frac{4}{3} \cdot \sqrt{2m} \cdot \frac{E^{\frac{3}{2}}}{F} =$$

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

откуда $E = (\frac{3F}{4\sqrt{2m}}\pi\hbar \cdot \left(n + \frac{1}{2}\right))^{2/3}$.

Задача 9.3. Найти энергии высоковозбужденных уровней в «одномерном кулоновском» потенциале: $U(x) = -q^2/(4\pi\varepsilon_0|x|)$.

Энергии E (по смыслу – и это мы дальше увидим непосредственно – $E < 0$) высоковозбужденных уровней могут быть определены в квазиклассическом приближении, то есть из формулы Бора-Зоммерфельда:

$$\int_a^b p(x) \cdot dx = 2 \cdot \int_0^b \sqrt{2m \cdot (E + q^2/(4\pi\varepsilon_0 x))} \cdot dx = \pi\hbar \cdot \left(n + \frac{1}{2}\right).$$

Здесь $x = a$ и $x = b$ – точки поворота (в этих точках подкоренное выражение равно нулю). Решение задачи сводится к вычислению выписанного выше интеграла. Обозначим $E = -A, q^2/4\pi\varepsilon_0 = B$ и сделаем замену переменной: $x = (B/A) \cdot \sin t$. Точка поворота (после сделанной замены): $t = \pi/2$. Теперь интегрирование тривиально, оно дает:

$$2 \cdot \sqrt{2m} \cdot \frac{B}{\sqrt{A}} \cdot \frac{\pi}{2} = \frac{\pi\sqrt{2m} \cdot q^2/4\pi\varepsilon_0}{\sqrt{-E}} = \pi\hbar \cdot \left(n + \frac{1}{2}\right).$$

Величиной «1/2» (справа) можно пренебречь, так как речь идет о высоковозбужденных уровнях, т.е. $n \gg 1$. Окончательно имеем:

$$E = -\frac{2m \cdot q^4}{\hbar^2 n^2 (4\pi\varepsilon_0)^2}.$$

Задача 9.4. Найти для водородоподобного иона радиус n-й орбиты и скорость электрона на ней.
Z – число протонов в ядре,
m – масса одного электрона.

Уравнение движения электрона на боровских орбитах (в системе СГС):

$$\begin{cases} n\hbar = mv_n a_n, \\ Z\frac{q^2}{{a_n}^2} = \frac{m{v_n}^2}{a_n}. \end{cases}$$

v_n – скорость электрона на n-й орбите радиуса a_n,
q – модуль заряда электрона.
Отсюда:

$$\begin{cases} v_n = \dfrac{n\hbar}{ma_n}, \\ Z\dfrac{q^2}{{a_n}^2} = \dfrac{mn^2\hbar^2}{a_n m^2 {a_n}^2}, \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} a_n = \dfrac{n^2\hbar^2}{Zq^2 m}, \\ v_n = \dfrac{n\hbar Z q^2 m}{mn^2\hbar^2} = \dfrac{Zq^2}{n\hbar}. \end{cases}$$

Задача 9.5. Определить круговую частоту обращения электрона на n-й круговой орбите водородоподобного иона.
Z – число протонов в ядре (полный заряд ядра),
m, q – масса и модуль заряда одного электрона.
Радиусы боровских орбит: $a_n = \frac{Z^2 q^4 m}{n^3 \hbar^3}$ (СГС).
Скорости электронов на орбитах: $v_n = \frac{Z^2 q^2}{n\hbar}$ (СГС).
Круговая частота может быть выписана сразу:

$$\omega_n = \frac{v_n}{a_n} = \frac{Z^2 q^4 m}{n^3 \hbar^3}.$$

Задача 9.6. Найти с помощью квазиклассической формулы вероятность D прохождения частицы с массой m и энергией E сквозь потенциальный барьер $U(x) = \begin{cases} U_0\left(1 - \frac{x^2}{l^2}\right), |x| \le l, \\ 0, |x| > l. \end{cases}$

Квазиклассическая формула:

$$D \sim \exp(-2 \cdot \int_a^b \sqrt{\frac{2m(U(x) - E)}{\hbar^2}} \cdot dx),$$

где пределы интегрирования (a, b) соответствуют точкам, в которых подкоренное выражение обращается в нуль. Для нашей функции $U(x)$ имеем:

$$-2 \cdot \int_a^b \sqrt{\frac{2m}{\hbar}} \cdot \sqrt{U_0\left(1 - \frac{x^2}{l^2}\right) - E dx} =$$

$$= -2 \cdot \sqrt{\frac{2m}{\hbar}} \cdot \int_a^b \frac{\sqrt{U_0}}{l} \cdot \sqrt{l^2\left(1 - \frac{E}{U_0}\right) - x^2 dx} =$$

$$= -2 \cdot \sqrt{\frac{2mU_0}{\hbar^2 l^2}} \times$$

$$\times \frac{1}{2} x \cdot \sqrt{l^2\left(1 - \frac{E}{U_0}\right) - x^2} + l^2\left(1 - \frac{E}{U_0}\right) \arcsin \frac{x}{l \cdot \sqrt{1 - \frac{E}{U_0}}}\Bigg|_a^b = \cdots$$

Здесь $b = -a = l\sqrt{1 - E/U_0}$. Предполагается, что $E < U_0$ (в противном случае квазиклассическую формулу вообще нельзя было бы применять).

$$\ldots = -\sqrt{\frac{2mU_0}{\hbar^2 l^2}} \cdot l^2 \cdot \left(1 - \frac{E}{U_0}\right) \cdot \left(\frac{\pi}{2} - \left(-\frac{\pi}{2}\right)\right) =$$

$$= -(U_0 - E) \cdot \pi l \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \frac{1}{\sqrt{U_0}}.$$

Окончательно получается:

$$D = \exp\left(-\frac{\pi l}{\hbar} \sqrt{\frac{2m}{U_0}} \cdot (U_0 - E)\right).$$

Задача 9.7. Найти уровни энергии частицы в поле $U(x) = U_0(e^{-2ax} - 2e^{-ax})$ (потенциал Морза).

Ответ: $E = -U_0\left(1 - \frac{\hbar a}{\sqrt{2mU_0}}\left(n + \frac{1}{2}\right)\right)^2; n + \frac{1}{2} < \frac{\sqrt{2mU_0}}{\hbar a}$.

Задача 9.8. Найти уровни энергии частицы в поле $U(x) = \beta x^4$ в квазиклассическом приближении.

Ответ: $E = (\frac{\pi}{2c\sqrt{2}} \cdot \frac{\hbar \beta^{1/4}}{m^{1/2}}(n + \frac{1}{2}))^{4/3}; C = \int_0^1 dx\sqrt{1 - x^4} \approx 0.89$.

Задача 9.9. Найти коэффициент прохождения через потенциальный барьер $U(x) = -F|x|$ при $E < 0$.

Ответ: $D \sim \exp(-\frac{8}{3}\frac{\sqrt{2m}}{\hbar F}(-E)^{3/2})$.

Задача 9.10. Найти коэффициент прохождения через потенциальный барьер: $U(x) = 0$ при $x < a$, $U(x) = U_0 a/x$ при $x > a$ $(E \ll U_0)$.

Ответ: $D \sim \exp(-\frac{\pi a\sqrt{2mU_0}}{\hbar}(\frac{U_0}{E})^{1/2})$.

Задача 9.11. Найти расстояние между соседними уровнями ΔE в квазиклассическом поле $U(x)$.

Ответ: $\Delta E = \hbar\omega$, где $\omega^{-1} = \frac{1}{\pi}\int_1^2 \frac{dx}{V(x)}, \omega$ – частота классического движения, $V(x) = \frac{p(x)}{m}, a, b -$ точки поворота.

10. Движение заряженных частиц в электрических и магнитных полях

В присутствии электрического и магнитного полей гамильтониан частицы, обладающей спином (так называемый гамильтониан Паули), имеет вид [9]:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \cdot \left(\hat{\boldsymbol{p}} - q\hat{\boldsymbol{A}}\right)^2 - \hat{\mu} \cdot B + q \cdot \varphi,$$

где $\boldsymbol{B} = rot\boldsymbol{A}$, $\boldsymbol{A}$ – векторный потенциал магнитного поля, φ – скалярный потенциал электрического поля. $\hat{\boldsymbol{p}} = -i\hbar\nabla, \hat{\mu} = \mu/s \cdot \hat{s}$ – магнитный момент частицы, $\hat{s}$ – оператор спина, μ – величина магнитного момента. Электрическое поле входит в гамильтониан через φ: $\boldsymbol{E} = -\nabla\varphi$. q и m – соответственно, масса и заряд частицы.

Если рассматривается движение электрона, то «q» всюду заменяется на «–e».

В однородном магнитном поле $\boldsymbol{H}$ (ось z выбирается в направлении поля) энергетический спектр частицы является дискретным в плоскости, перпендикулярной к магнитному полю:

$$E_n = \hbar\omega_H \cdot \left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{p_z^2}{2m} - \frac{\mu\sigma}{s}\mu_0 H;$$

$$\omega_H = \frac{|q|\mu_0 H}{m}.$$

Конкретно для свободного электрона $\mu\sigma/s = \pm(1/2) \cdot |e|\hbar/m$.

Оператор скорости частицы в присутствии магнитного поля равен:

$$\hat{\boldsymbol{V}} = \frac{1}{2m}\left(\hat{\boldsymbol{p}} - q\hat{\boldsymbol{A}}\right).$$

Формулы, относящиеся к эффекту Зеемана, см. в книге И.Е. Иродова.

Задача 10.1. Рассмотреть расщепление второго квантового уровня атома водорода ($n = 2$) в электрическом поле.

Состояние электрона с $n = 2$ в атоме водорода вырождено четырехкратно (спиновое вырождение не рассматривается) – ему соответствуют волновые функции:

$$\Psi_1^{(0)} = Y_{00}X_{20} = \sqrt{1/4\pi}\sqrt{2a^3} \cdot e^{-\frac{r}{2a}}\left(1 - \frac{r}{2a}\right),$$

$$\mathrm{a} = \frac{(h/2\pi)^2 4\pi\varepsilon_0}{mq^2},$$

$$\Psi_2^{(0)} = Y_{10}X_{21} = \sqrt{3/4\pi}\cdot\cos(\theta)\cdot a^{-3/2}\cdot\sqrt{1/24}\cdot e^{-\frac{r}{2\mathrm{a}}}\cdot\frac{r}{\mathrm{a}},$$

$$\Psi_3^{(0)} = Y_{11}X_{21} = \sqrt{3/8\pi}\cdot\sin(\theta)\cdot e^{i\varphi}\mathrm{a}^{-3/2}\cdot\sqrt{1/24}\cdot e^{-\frac{r}{2\mathrm{a}}}\cdot\frac{r}{\mathrm{a}},$$

$$\Psi_4^{(0)} = Y_{1-1}X_{21} = \sqrt{3/8\pi}\cdot\sin(\theta)\cdot e^{-i\varphi}\mathrm{a}^{-3/2}\cdot\sqrt{1/24}\cdot e^{-\frac{r}{2\mathrm{a}}}\cdot\frac{r}{\mathrm{a}}.$$

Ось, от которой отсчитываются углы θ («ось z»), можно выбрать произвольно, но она одна и та же для всех $\Psi_l^{(0)}$. Выберем эту ось совпадающей с направлением электрического поля $\boldsymbol{E}$. (Произвол в выборе оси z связан с эквивалентностью направлений в невозмущенном атоме водорода: хотя волновые функции зависят не только от r, но и от θ, φ, все направления оказываются эквивалентными из-за неопределенности положения оси отсчета).

С учетом сделанного выбора оси z, возмущение, связанное с электрическим полем, имеет вид (q – модуль заряда электрона):

$$\hat{V} = q\boldsymbol{Er} = qEr\cos(\theta).$$

Чтобы определить приближенно поправку к уровню $\mathrm{E}_2^{(0)}$ (поправка обозначается $\mathrm{E}_2^{(1)}$), необходимо обеспечить, согласно теории возмущений,

$$\det\left\|V_{ij} - \delta_{ij}E_2^{(0)}\right\| = 0.$$

Здесь V_{ij} – матричный элемент возмущения:

$$V_{ij} = \int \Psi_i^{(0)^*}\cdot\hat{V}\cdot\Psi_j^{(0)} r^2 dr\sin(\theta)d\theta d\varphi.$$

Имея конкретные выражения для $\Psi_i^{(0)}$, можно убедиться в том, что все $V_{ij} = 0$, кроме $V_{12} = V_{21} \neq 0$:

$$V_{12} = \frac{qE3^{1/2}}{4\pi}\sqrt{12}\mathrm{a}^{-4}\int_0^{\infty}\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} e^{-\frac{r}{2\mathrm{a}}}(1-\frac{r}{2\mathrm{a}})e^{-\frac{r}{2\mathrm{a}}}\cdot\frac{r}{2\mathrm{a}}\cdot r\cdot$$
$$\cdot\cos^2\theta r^2\sin(\theta)\,d\theta d\varphi dr = -3qE.$$

Напишем определитель в явном виде:

$$0 = \begin{vmatrix} -\mathrm{E}_2^{(1)} & V_{12} & 0 & 0 \\ V_{12} & -\mathrm{E}_2^{(1)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\mathrm{E}_2^{(1)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\mathrm{E}_2^{(1)} \end{vmatrix} = \left(\mathrm{E}_2^{(1)}\right)^2\left(\left(\mathrm{E}_2^{(1)}\right)^2 - V_{12}{}^2\right).$$

Отсюда находим три возможных значения поправки $\mathrm{E}_2^{(1)}$:

$$\mathrm{E}_2^{(1)} = 0;\ \mathrm{E}_2^{(1)} = -3qE;\ \mathrm{E}_2^{(1)} = +3qEa.$$

Таким образом, вырождение снимается лишь частично: четырехкратно вырожденный уровень расщепляется лишь на три разных.

Задача 10.2. На атом водорода, находящийся при $t = -\infty$ в основном состоянии, действует переменное однородное электрическое поле $\boldsymbol{E} = \boldsymbol{E}_0 e^{-|t|/\tau}$. Найти в первом порядке теории возмущений вероятность возбуждения атома в $2s-$ и $2p-$состояниях.

Предварительно выпишем волновые функции электрона в рассматриваемых состояниях $(1s, 2s, 2p)$. $2p$ – это три состояния, отвечающие различным значениям магнитного квантового числа m $(m = 0, -1, 1)$.

В записи $\Psi_{nlm}^{(0)}$: n – главное квантовое число, l – орбитальное, m – магнитное.

$$1s\colon \Psi_{000}^{(0)} = Y_{00} X_{10},$$
$$2s\colon \Psi_{200}^{(0)} = Y_{00} X_{20},$$
$$2p\colon \Psi_{210}^{(0)} = Y_{10} X_{21};\ \Psi_{211}^{(0)} = Y_{11} X_{21};\ \Psi_{21-1}^{(0)} = Y_{1-1} X_{21};$$
$$Y_{00} = \sqrt{1/4\pi};\ X_{10} = (2a)^{-3/2} e^{-\frac{r}{a}};\ a = \frac{(h/2\pi)^2 4\pi\varepsilon_0}{mq^2},$$
$$Y_{10} = \sqrt{3/4\pi}\cos(\theta);\ X_{20} = (1/2a)^{3/2}(2 - r/a) e^{-\frac{r}{2a}};$$
$$Y_{1\pm1} = \sqrt{3/8\pi}\sin(\theta)\, e^{\pm i\varphi};\ X_{21} = a^{-3/2}\sqrt{1/24} e^{-\frac{r}{2a}} \frac{r}{a}.$$

Выберем ось z (от которой отсчитываются углы θ) совпадающей с направлением $\boldsymbol{E}_0$. Тогда возмущение, связанное с наличием электрического поля, имеет вид (q – модуль заряда электрона):

$$\hat{V} = q\boldsymbol{E}\boldsymbol{r} = qE_0 r\cos(\theta) e^{-|t|/\tau}.$$

Матричные элементы возмущения:

$$\int \Psi_{200}^{(0)^*} \hat{V} \Psi_{100}^{(0)} \sin(\theta)\, d\theta d\varphi r^2 dr,$$
$$\int \Psi_{210}^{(0)^*} \hat{V} \Psi_{100}^{(0)} \sin(\theta)\, d\theta d\varphi r^2 dr,$$
$$\int \Psi_{211}^{(0)^*} \hat{V} \Psi_{100}^{(0)} \sin(\theta)\, d\theta d\varphi r^2 dr,$$
$$\int \Psi_{21-1}^{(0)^*} \hat{V} \Psi_{100}^{(0)} \sin(\theta)\, d\theta d\varphi r^2 dr,$$

(пределы интегрирования: по r $(0\ +\infty)$, по φ $(0\ 2\pi)$, по θ $(0\ \pi)$).

Непосредственной проверкой можно убедиться в том, что из четырех выписанных матричных элементов отличен от нуля лишь нижний левый. Верхний левый обращается в нуль при интегрировании по θ, оба правых – из-за интегрирования по φ. Вычислим единственный не равный нулю матричный элемент.

$$V_{210-100} = \int_0^\infty dr r^2 \int_0^\pi \sin(\theta)\, d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi\, Y_{10}^* X_{21} q E_0 r\cos(\theta) e^{-\frac{|t|}{\tau}} Y_{00} X_{10} =$$

$$= qE_0 e^{-\frac{|t|}{\tau}} \int_0^{\infty} r^2 \, (\int_0^{\pi} \sin(\theta)\cos(\theta)\sqrt{3/4\pi})\cos(\theta)\sqrt{1/4\pi}d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi.$$

$$a^{-\frac{3}{2}}\sqrt{\frac{1}{24}}e^{-\frac{r}{2a}}\frac{r}{a}\cdot 2(a)^{-\frac{3}{2}}e^{-\frac{r}{a}}dr =$$

$$= qE_0 e^{-\frac{|t|}{\tau}} \cdot \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cdot \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \cdot \sqrt{\frac{1}{24}} \cdot 2\pi \cdot$$

$$\cdot \frac{2}{a^4}\int_0^{\pi} \cos^2\theta \sin(\theta)\, d\theta \int_0^{\infty} e^{-\frac{3r}{2a}} r^4 dr =$$

$$= -\frac{qE_0 e^{-\frac{|t|}{\tau}}}{a^4}\sqrt{\frac{3}{24}}\left|\frac{\cos^3\theta}{3}\right|_0^{\pi} \cdot \frac{4!}{\left(\frac{3}{2a}\right)^5} = \frac{qE_0 e^{-\frac{|t|}{\tau}}}{a^4} \cdot 2 \cdot \frac{4! \cdot 2^5 \cdot a^5}{3^6 \cdot 2 \cdot 2^{\frac{1}{2}}} =$$

$$= qE_0 e^{-\frac{|t|}{\tau}} \cdot a \cdot \frac{2^8}{3^5 \cdot 2^{\frac{1}{2}}};$$

Вычислим теперь вероятность перехода в $2p$– состояния (вероятность перехода в $2s$– состояния равна нулю):

$$W = \frac{1}{\left(\frac{h}{2\pi}\right)^2}\left|\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega t} V_{210-100}(t)dt\right|^2 =$$

$$= \frac{1}{\left(\frac{h}{2\pi}\right)^2}\frac{2^{16}a^2q^2}{2 \cdot 3^{10}}E_0^2 \cdot \left|\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega t} e^{-\frac{|t|}{\tau}} dt\right|^2 =$$

$$= \frac{1}{\left(\frac{h}{2\pi}\right)^2}\frac{2^{15}a^2q^2}{3^{10}}E_0^2 \cdot \left|\frac{2}{\frac{1}{\tau} - i\omega}\right|^2 =$$

$$= \frac{1}{\left(\frac{h}{2\pi}\right)^2}\frac{4\tau^2}{1+\omega^2\tau^2}\frac{2^{15}a^2q^2E_0^2}{3^{10}}.$$

Здесь $\omega = \frac{mq^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2 \cdot 2 \cdot \left(\frac{h}{2\pi}\right)^2} \cdot (1^{-2} - 2^{-2})$.

Примечание. Поскольку в атоме водорода потенциальная энергия U радиально-симметрична, результат не может зависеть от направления $\boldsymbol{E}$, так что выбор направления $\boldsymbol{E}$ совпадающим с направлением z не является некорректным. Нужно еще учесть, что, помимо выписанных функций $\Psi_{nlm}^{(0)}$, их линейные комбинации – также решения уравнения Шредингера.

Задача 10.3. Свести задачу о движении заряженной частицы в магнитном поле к задаче об осцилляторе. Найти возможные значения энергии частицы (заряд q, масса m – известны).

Уравнение Шредингера для бесспиновой частицы в однородном магнитном поле $\boldsymbol{B}$ имеет вид:

$$\frac{1}{2m}\cdot\left(\widehat{\boldsymbol{p}}-q\widehat{\boldsymbol{A}}\right)^2\Psi=E\Psi.$$

Вектор-потенциал поля $\boldsymbol{A}$ мы выберем в виде $\boldsymbol{A}=Bx\cdot\boldsymbol{e}_y$, то есть так, что у него имеется лишь y –компонента, линейно зависящая от x. Тогда $\boldsymbol{B}$ направлено по оси z.

$$\left(\widehat{\boldsymbol{p}}-q\widehat{\boldsymbol{A}}\right)^2=\left(\widehat{p_x}\boldsymbol{e}_x+\widehat{p_y}\boldsymbol{e}_y+\widehat{p_z}\boldsymbol{e}_z-Bq\hat{x}\boldsymbol{e}_y\right)^2=$$
$$=\widehat{p_x}^2+\widehat{p_y}^2+\widehat{p_z}^2+B^2q^2x^2-2p_yxBq.$$

Заметим, что

$$\widehat{p_x}^2=-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\ \left(\text{и аналогично}\,\widehat{p_y}^2,\widehat{p_z}^2\right),$$
$$\widehat{p_x}=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}.$$

Выберем Ψ в виде:

$$\Psi=\exp\left(i\frac{p_y}{\hbar}y\right)\cdot\exp\left(i\frac{p_z}{\hbar}z\right)\cdot\varphi(x)=\zeta\cdot\varphi(x),$$

тогда:

$$\frac{1}{2m}\cdot\left(\widehat{\boldsymbol{p}}-q\widehat{\boldsymbol{A}}\right)^2\zeta\cdot\varphi=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\varphi''\zeta+i^2\frac{p_y{}^2}{\hbar^2}\zeta\varphi+i^2\frac{p_z{}^2}{\hbar^2}\zeta\varphi\right)+$$
$$+\frac{B^2q^2x^2}{2m}\zeta\varphi+2\frac{i\hbar}{m}xBqi\frac{p_y}{\hbar}\zeta\varphi=$$
$$=-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi''\zeta+\frac{p_y{}^2}{2m}\zeta\varphi+\frac{p_z{}^2}{2m}\zeta\varphi+\frac{B^2q^2x^2}{2m}\zeta\varphi-\frac{Bqp_yx}{m}\zeta\varphi.$$

Все это должно быть равно $\zeta\varphi E$.

После сокращения на ζ получаем:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi''+\frac{B^2q^2}{2m}\left(x-\frac{p_y}{Bq}\right)^2\cdot\varphi+\frac{p_z{}^2}{2m}\cdot\varphi=E\varphi.$$

Это – уравнение осциллятора:

$$-A\varphi''+B(x-x_0)^2\cdot\varphi=C\cdot\varphi,$$
$$A=\frac{\hbar^2}{2m};B=\frac{B^2q^2}{2m};\ x_0=\frac{p_y}{Bq};C=E-\frac{p_z{}^2}{2m},$$

его решение имеет вид:

$$\Psi=\frac{1}{\sqrt{2^n n!\,\pi^{1/2}l}}\cdot e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2l^2}}\cdot H_n\left(\frac{x-x_0}{l}\right),$$
$$C=2\cdot\sqrt{AB}\cdot\left(n+\frac{1}{2}\right),l=\left(\frac{A}{B}\right)^{1/4}.$$

В «обычных» обозначениях:

$$E = \frac{\hbar q B}{m}\left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{{p_z}^2}{2m},$$

$$\Psi = \zeta\varphi = \exp\left(i\frac{p_y}{\hbar}y + i\frac{p_z}{\hbar}z\right) \cdot \frac{1}{\sqrt{2^n n!\,\pi^{1/2} l}} \cdot e^{-\frac{\left(x - \frac{p_y}{Bq}\right)^2}{2l^2}} \cdot H_n\left(\frac{x - \frac{p_y}{Bq}}{l}\right),$$

При этом

$$l = (\frac{\hbar}{Bq})^{1/2}.$$

Задача 10.4. Получить выражение для энергии частицы массы m с зарядом q, движущейся в скрещенных полях $\boldsymbol{B}$ и $\boldsymbol{E}$. $\boldsymbol{E} = E \cdot \boldsymbol{e}_x$, а векторный потенциал магнитного поля $\boldsymbol{A} = Bx \cdot \boldsymbol{e}_y$. Свести эту задачу к уравнению осциллятора.

Уравнение Шредингера для частицы имеет вид:

$$\left[\frac{1}{2m} \cdot \left(\widehat{\boldsymbol{p}} - q\widehat{\boldsymbol{A}}\right)^2 + U\right]\Psi = E\Psi.$$

Потенциальная энергия U зависит от координаты как

$$U = U_0 - qEx.$$

Положим $U_0 = 0$.

Теперь находим, чему равно $\left(\widehat{\boldsymbol{p}} - q\widehat{\boldsymbol{A}}\right)^2$:

$$\left(\widehat{\boldsymbol{p}} - q\widehat{\boldsymbol{A}}\right)^2 = \left(\widehat{p_x}\boldsymbol{e}_x + \widehat{p_y}\boldsymbol{e}_y + \widehat{p_z}\boldsymbol{e}_z - Bqx\boldsymbol{e}_y\right)^2 =$$
$$= \widehat{p_x}^2 + \widehat{p_y}^2 + \widehat{p_z}^2 + B^2q^2x^2 - 2p_y xBq.$$

Будем искать Ψ в виде:

$$\Psi = e^{i\frac{p_z}{\hbar}z} e^{i\frac{p_y}{\hbar}y} \cdot \varphi(x) = \xi \cdot \varphi.$$

Воспользуемся тем, что при таком выборе Ψ

$$\widehat{p_x}^2\Psi = -\hbar^2\xi \cdot \varphi'',$$
$$\widehat{p_y}^2\Psi = p_y^2 \cdot \Psi = p_y^2\xi \cdot \varphi,$$
$$\widehat{p_y}\Psi = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}(\xi\varphi) = p_y\xi \cdot \varphi,$$
$$\widehat{p_z}^2\Psi = p_z^2 \cdot \Psi = p_z^2\xi \cdot \varphi.$$

Подставив все это в начальное уравнение (*), имеем (после сокращения на ξ, которое входит во все слагаемые как сомножитель):

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi'' + \frac{{p_y}^2}{2m} \cdot \varphi + \frac{{p_z}^2}{2m} \cdot \varphi + \frac{B^2q^2x^2}{2m}\varphi - \frac{2qBp_y}{2m}x\varphi - qEx\varphi = E\varphi.$$

Последнее слагаемое в левой части появилось из-за потенциальной энергии U. Теперь нам необходимо привести это уравнение к уравнению для осциллятора:

$$-\mathcal{A}\varphi'' + \mathcal{B}(x - x_0)^2 \cdot \varphi = \mathcal{C} \cdot \varphi,$$

где $\mathcal{A}, \mathcal{B}, \mathcal{C}$ – некоторые константы ($\mathcal{A}, \mathcal{B}, \mathcal{C}$ написаны курсивом, чтобы избежать путаницы с A, B).

Имеем:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi'' + \frac{{p_y}^2}{2m}\varphi + \frac{{p_z}^2}{2m}\varphi + \frac{B^2q^2}{2m}\left(x^2 - \left(\frac{2p_y}{qB} + \frac{qE\cdot 2m}{B^2q^2}\right)x + x_0^2\right)\varphi -$$

$$-\frac{q^2B^2x_0^2}{2m}\varphi = E\varphi.$$

Здесь

$$x_0 = \frac{p_y}{qB} + \frac{mE}{qB^2}$$

(мы, таким образом, выделили полный квадрат). Заметим, что

$$\frac{B^2q^2}{2m}x_0^2 = \frac{B^2q^2}{2m}\left(-\frac{{p_y}^2}{q^2B^2} + \frac{2p_ymE}{q^2B^3} + \frac{m^2E^2}{q^2B^4}\right) = \frac{{p_y}^2}{2m} + \frac{p_yE}{B} + \frac{mE^2}{2B^2},$$

так что уравнение перепишется:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi'' + \frac{B^2q^2}{2m}(x-x_0)^2\varphi = \left(E + \frac{B^2q^2}{2m}x_0^2 - \frac{{p_z}^2}{2m} - \frac{{p_y}^2}{2m}\right) =$$

$$= \left(E - \frac{{p_z}^2}{2m} + \frac{p_yE}{B} + \frac{mE^2}{2B^2}\right)\varphi.$$

Согласно теории осциллятора, величина в квадратных скобках (ее выше мы обозначали как C) принимает значения:

$$\left(n + \frac{1}{2}\right)\cdot 2\cdot\sqrt{AB},$$

где $A = \frac{\hbar^2}{2m}, B = \frac{B^2q^2}{2m}$.

Таким образом, $C = \frac{\hbar qB}{m}\left(n + \frac{1}{2}\right)$, а

$$E = \frac{\hbar qB}{m}\left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{{p_z}^2}{2m} - \frac{p_yE}{2m} - \frac{mE^2}{2B^2}.$$

Задача 10.5. Вычислить g–фактор для следующих термов: а) $^4D_{1/2}$ б) $^5F_2$ в) $^5P_1$.

а) Обозначение терма « $^4D_{1/2}$» соответствует орбитальному числу $L = 2 = 4/2$.

$$2S + 1 = 4 \Leftrightarrow S = 3/2.$$

$$J = 1/2.$$

$$g = 1 + \frac{1}{2}\frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{J(J+1)}.$$

Для указанных выше значений J, S, L получаем:

$$g = 1 + \frac{1}{2}\cdot\frac{\frac{1}{2}\cdot\frac{3}{2} + \frac{3}{2}\cdot\frac{5}{2} - \frac{4}{2}\cdot\frac{6}{2}}{\frac{1}{2}\cdot\frac{3}{2}} = 1 + \frac{1}{2}\cdot\frac{1\cdot 3 + 3\cdot 5 - 4\cdot 6}{1\cdot 3} =$$

$$= 1 + \frac{1}{2}\cdot\frac{3 + 15 - 24}{3} = 1 + \frac{1}{2}\cdot(-2) = 0.$$

б) $^5F_2 \to S = 2\ (2S+1 = 5),\ \ L = 3, J = 2.$

$$g = 1 + \frac{1}{2} \cdot \frac{2 \cdot 3 + 2 \cdot 3 - 3 \cdot 4}{2 \cdot 3} = 1 + 0 = 1.$$

в) ${}^5P_1 \to S = 2, L = 3, J = 2.$

$$g = 1 + \frac{1}{2} \cdot \frac{1 \cdot 2 + 2 \cdot 3 - 1 \cdot 2}{1 \cdot 2} = 1 + \frac{6}{4} = \frac{5}{2}.$$

Задача 10.6. На сколько подуровней расщепится в слабом магнитном поле терм а) ${}^3P_0$; б) ${}^2F_{5/2}$.

а) Терму ${}^3P_0$ соответствует $J = 0$, то есть кратность вырождения равна единице ($2J + 1 = 1$). Получается, что даже в отсутствие магнитного поля состояние ${}^3P_0$ – невырожденное, так что при наложении поля расщепления нет.

б) Терму ${}^2F_{5/2}$ соответствует $S = \frac{1}{2}, L = 3 = \frac{6}{2}, J = 5/2$. Кратность вырождения $2J + 1 = 2 \cdot \frac{5}{2} + 1 = 6$.

Убедимся, что g– фактор отличен от нуля (что расщепление в принципе есть):

$$g = 1 + \frac{1}{2} \cdot \frac{\frac{5}{2} \cdot \frac{7}{2} + \frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2} - \frac{6}{2} \cdot \frac{8}{2}}{\frac{5}{2} \cdot \frac{7}{2}} = 1 + \frac{1}{2} \cdot \frac{35 + 3 - 48}{35} = 1 - \frac{10}{70} \neq 0.$$

Таким образом, указанный терм расщепится на 6 подуровней (такова кратность вырождения).

Задача 10.7. Зарисовать схематически картину расщепления уровней в слабом магнитном поле: а) переход ${}^2D_{3/2} \to {}^2P_{1/2}$; б) переход ${}^5I_5 \to {}^5I_4$.

В слабом магнитном поле терм ${}^{2s+1}(L)_j$ расщепляется на $2J + 1$ подуровней. Если энергия терма до наложения магнитного поля была $E_{nlj}^{(0)}$, то при наложении поля E энергии подуровней будут:

$$E = E_{nlj}^{(0)} + \frac{qB(h/2\pi)}{2m} \cdot \widetilde{m} \cdot g.$$

$\widetilde{m}$ принимает $2J + 1$ значение:
если J – целое, то $\widetilde{m} = -J, -J + 1, \ldots, 0, \ldots, J - 1, J$;
если J – нецелое, то $\widetilde{m} = \pm 1/2, \pm 3/2, \ldots, \pm J$.
m – масса электрона,
g – фактор для данного терма, равный

$$g = 1 + \frac{1}{2} \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{J(J+1)}.$$

а) Вычислим g– факторы для состояний, между которыми происходит переход:

$${}^2D_{3/2}$$

$$S = \frac{1}{2}; L = 2 = \frac{4}{2}; J = \frac{3}{2},$$

$$g = 1 + \frac{1}{2} \cdot \frac{\frac{3}{2} \cdot \frac{5}{2} + \frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2} - \frac{4}{2} \cdot \frac{6}{2}}{\frac{3}{2} \cdot \frac{5}{2}} = 1 - \frac{6}{30} = \frac{4}{5},$$

кратность вырождения $2J + 1 = 4$.

$$^{2}P_{1/2},$$

$$S = \frac{1}{2}; L = 1 = \frac{2}{2}; J = \frac{1}{2},$$

$$g = 1 + \frac{1}{2} \cdot \frac{\frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2} + \frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2} - \frac{2}{2} \cdot \frac{4}{2}}{\frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2}} = 1 - \frac{2}{3} = \frac{1}{3} \left(\text{это меньше, чем } \frac{4}{5}\right),$$

кратность: $2J + 1 = 2$

Получилось, что верхнее состояние ($^{2}D_{3/2}$) расщепляется на 4 подуровня, нижнее – на 2 подуровня. Расстояния между «верхними» подуровнями больше, чем расстояние между «нижними» (из-за разницы в g-факторах). Для обоих термов J нецелое, поэтому сдвиг подуровня относительно «нерасщепленного» энергетического уровня всегда существует ($\widetilde{m} \neq 0$) (рисунок 12).

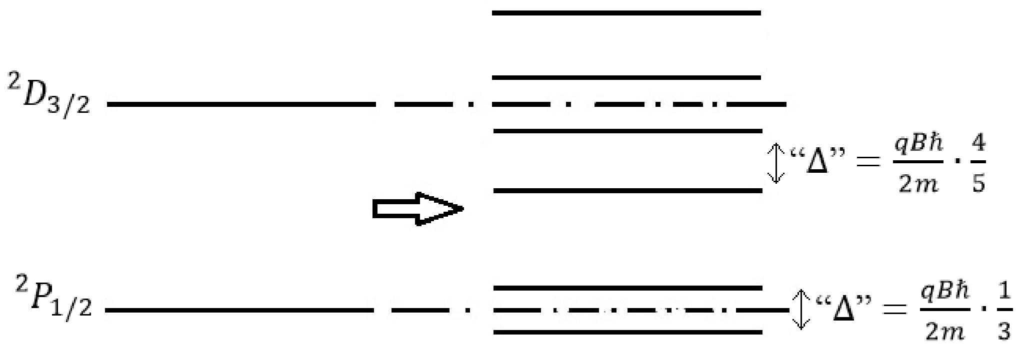


Рисунок 12 – Уровни

б) g–факторы для рассматриваемых состояний равны:

$$^{5}I_{5}$$

$$S = 2; L = 6; J = 5,$$

$$g = 1 + \frac{1}{2} \cdot \frac{5 \cdot 6 + 2 \cdot 3 - 6 \cdot 7}{5 \cdot 6} = 1 - \frac{6}{60} = \frac{9}{10},$$

кратность $2J + 1 = 11$.

$$^{5}I_{4},$$

$$S = 2; L = 6; J = 4,$$

$$g = 1 + \frac{1}{2} \cdot \frac{4 \cdot 5 + 2 \cdot 3 - 6 \cdot 7}{4 \cdot 5} = 1 - \frac{16}{40} = \frac{6}{10} \;\; \left(\frac{6}{10} < \frac{9}{10}\right),$$

кратность $2J + 1 = 9$.

Получилось, что верхнее состояние ($^{5}I_{5}$) расщепляется на 11 подуровней, нижнее – на 9 подуровней (рисунок 13). Расстояние между «верхними» подуровнями больше, чем между «нижними» (из-за разницы в g-факторах). Для обоих термов J – целое, так что остаются энергетические подуровни, отвечающие исходной энергии нерасщепленных термов (может быть $\tilde{m} = 0$ в формуле для зеемановского расщепления).

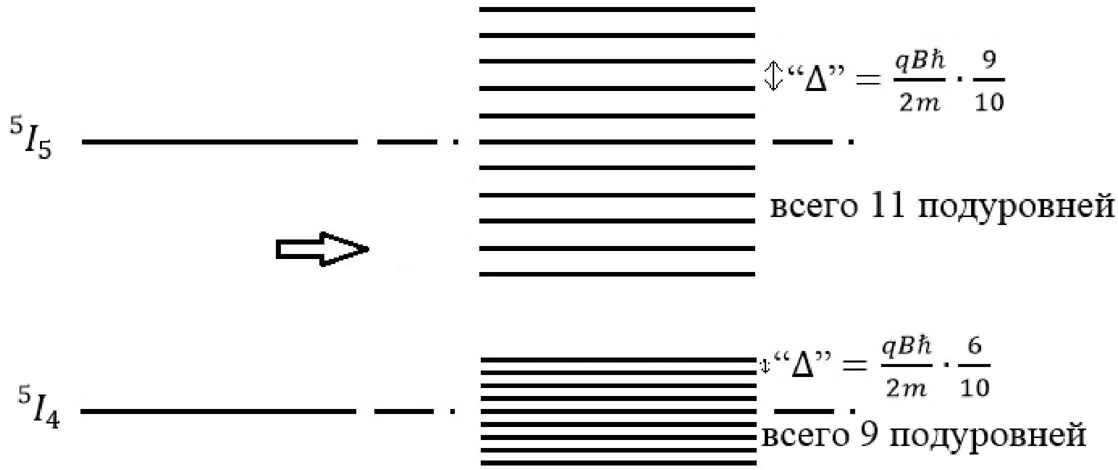


Рисунок 13 – $^5I_5$ и $^5I_4$

11. Симметрия кристаллов

Задача 11.1. В каких средах возможен гальваномагнитный эффект (возникновение электрического тока в однородном магнитном поле), описываемый соотношением $\boldsymbol{j} \propto \boldsymbol{B}$ [8].

Решение. Электрический ток является полярным вектором, а магнитное поле — аксиальным (или псевдо-) вектором. При пространственных поворотах полярный и аксиальный векторы преобразуются одинаково, а при пространственной инверсии — по-разному (полярный вектор меняет знак). Поэтому гальваномагнитный эффект допустим лишь в средах, группа симметрии которых не включает в себя пространственную инверсию. Это условие является необходимым, но не достаточным.

Задача 11.2. Может ли неоднородное распределение температуры вызывать (а) электрический ток и (б) магнитное поле в кубических полупроводниках.

Указание. Неоднородное распределение температуры удобно характеризовать ее градиентом, ∇T, который является полярным вектором.

Задача 11.3. Тензором какого ранга описывается магнитоупругий эффект (возникновение намагниченности среды при ее деформации).

Указание. Деформации характеризуются тензором второго ранга, а магнитное поле — псевдотензор первого ранга (аксиальный вектор).

Задача 11.4. Объясните кажущееся противоречие: электрический ток и электрическое поле связаны законом Ома ($\boldsymbol{j} = \hat{\sigma}\boldsymbol{E}$), при этом электрическое поле инвариантно к инверсии времени, а электрический ток — меняет при инверсии времени знак.

Ответ. При инверсии времени меняют знаки также величины, описывающие диссипацию, в данном случае тензор проводимости $\hat{\sigma}$.

12. Колебания, волны и разложения в ряды Фурье

При упругом рассеянии энергия рассеянного фотона должна быть равна энергии падающего. Закон дисперсии электромагнитной волны гласит: $\omega = ck$. Следовательно, при упругом рассеянии не может измениться модуль волнового вектора: $k = k_0$. Выясним теперь, при каких условиях это равенство совместимо с условием рассеяния $\boldsymbol{k} = \boldsymbol{k}_0 + \boldsymbol{B}$. Другими словами, выясним, каким должен быть волновой вектор $\boldsymbol{k}_0$, чтобы волна могла куда-нибудь рассеяться. Для этого возведем равенство $\boldsymbol{k}_0 + \boldsymbol{B} = \boldsymbol{k}$ в квадрат, учитывая, что $k^2 = k_0^2$. В результате получим:

$$(\boldsymbol{k}_0\boldsymbol{B}) = -\frac{B^2}{2}.$$

Упругое рассеяние волны с волновым вектором $\boldsymbol{k}_0$ возможно, только если найдется такой вектор обратной решетки $\boldsymbol{B}$**,** при котором будет удовлетворяться это равенство [8].

Задача 12.1. Рассмотрим электрон, представляющий собой в момент $t = 0$ гауссов одномерный волновой пакет $f(x) = f_0\exp(-x^2/d^2)$, где f_0 — нормировочная постоянная, d — размер пакета. Опишите расплывание этого пакета со временем.

Указание. Перейдите к фурье-представлению и воспользуйтесь следующим уравнением:

$$f(\boldsymbol{r}, t) = \int\limits_{\Delta^3 k} d^3kA(\boldsymbol{k})e^{i(\boldsymbol{kr}-\omega(\boldsymbol{k})t)}.$$

Задача 12.2. Получите условие дифракции рентгеновских лучей на системе параллельных атомных плоскостей, расстояние между которыми равно d. Сравните его со следующим уравнением

$$(\boldsymbol{k}_0\boldsymbol{B}) = -\frac{B^2}{2}.$$

Ответ. Это условие Брегга (иногда называемое условием Брегга–Вульфа):

$$2d\sin\Theta = n\lambda, n \in \mathrm{N},$$

где λ — длина волны рентгеновского излучения; Θ — угол между направлением падения лучей и атомными плоскостями.

Задача 12.3. Докажите, что обратной к кубической гранецентрированной решетке будет кубическая объемноцентрированная (и наоборот).

Указание. Выпишите явный вид векторов обратной решетки в декартовой системе координат. В качестве базисных векторов ГЦК решетки можно взять, например,

$$\boldsymbol{a}_1 = \frac{a}{2}(\boldsymbol{e}_y + \boldsymbol{e}_z), \boldsymbol{a}_2 = \frac{a}{2}(\boldsymbol{e}_x + \boldsymbol{e}_z), \boldsymbol{a}_3 = \frac{a}{2}(\boldsymbol{e}_x + \boldsymbol{e}_y).$$

13. Колебания кристаллической решетки

Рассмотрим одномерную периодическую цепочку атомов – одномерный кристалл с одним атомом в элементарной ячейке. Пусть период этой цепочки будет равен a. Тогда в состоянии равновесия координата n-го атома цепочки x_n будет равна na [8].

Обозначим через u_n смещение n-го атома из положения равновесия. Будем считать, что атомы взаимодействуют только с ближайшими соседями. Сила, с которой $(n+1)$-й атом действует на n-й, зависит от разности смещений этих двух атомов $u_{n+1} - u_n$. При небольших смещениях ($|u_{n+1} - u_n| \ll a$) эту силу можно считать пропорциональной разности смещений: $F_{n,n+1} = \gamma(u_{n+1} - u_n)$, где γ – коэффициент пропорциональности. Удобно представить, что атомы связаны друг с другом пружинками с жесткостью γ.

На рисунке 14 пружинка между n-м и $(n+1)$-м атомами растянута, так что ее упругая сила действует на n-й атом в положительном направлении. Растянутая пружинка между $(n-1)$-м и n-м атомом действует на n-й атом в отрицательном направлении с силой $F_{n,n-1} = -\gamma(u_n - u_{n-1})$.

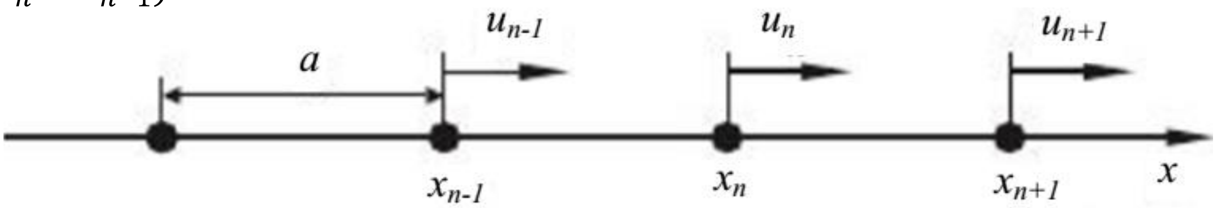


Рисунок 14 – Одномерная цепочка с одним атомом в элементарной ячейке

Запишем закон Ньютона для n-го атома цепочки:

$$M\frac{d^2u_n}{dt^2} = F_{n,n+1} + F_{n,n-1} = \gamma(u_{n+1} - u_n) - \gamma(u_n - u_{n-1}),$$

где M – масса атома. При выводе уравнения мы учли, что производные по времени от смещения атома и от его координаты равны.

Первое слагаемое в правой части – это сила, действующая на n-й атом со стороны $n+1$-го, второе – сила, действующая со стороны $n-1$-го атома.

После упрощения получим

$$M\frac{d^2u_n}{dt^2} = \gamma[u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n].$$

Система таких уравнений, записанных для каждого атома, полностью описывает колебания цепочки.

Если рассматривать только длинноволновые колебания, то есть колебания с длиной волны, много большей периода цепочки a, то можно заменить разность $u_{n+1}-u_n$ на $(\partial u_n/\partial x)a$, а величину, стоящую в правой части уравнения, на $\gamma a^2(\partial^2 u/\partial x^2)$. В результате получим волновое уравнение

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}=a^2\frac{\gamma}{M}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2},$$

решением которого являются волны $u=A\exp(ikx-i\omega t)$ с линейным законом дисперсии $\omega=s|k|$ (звуковые волны). Здесь s – скорость звука:

$$s=a\sqrt{\frac{\gamma}{M}}.$$

Задача 13.1. Чем отличается форма оптических и акустических колебаний в длинноволновом пределе ($ka\ll 1$).

Решение. В длинноволновом пределе ($ka\ll 1$), согласно следующим формулам:

$$(2\gamma-M_1\omega^2)A-\gamma\left(e^{ika}+1\right)B=0,$$
$$\gamma\left(e^{-ika}+1\right)A+(2\gamma-M_2\omega^2)B=0$$

и

$$\frac{B}{A}=\frac{2\gamma-M_1\omega^2}{\gamma(e^{ika}+1)},$$

имеем

$$\frac{B}{A}=1-\frac{M_1\omega^2}{2\gamma},$$

где A и B — амплитуды колебаний меньшего и большего атомов.
а) Для акустических колебаний, в длинноволновом пределе, $\omega=s|k|$ и стремится к нулю. Тогда $\frac{B}{A}=1$. Это значит, что амплитуды колебаний легкого и тяжелого атомов одинаковы. Следовательно, оба атома колеблются в фазе. б) Для оптической ветви при $k=0$ ($\omega^2(0)=\frac{\gamma}{\mu}+\sqrt{\frac{\gamma^2}{\mu^2}}=\frac{2\gamma}{\mu}$)

$$\omega^2(0)=\frac{2\gamma}{\mu}.$$

Тогда

$$\frac{B}{A}=\frac{2\gamma-M_1(2\gamma/\mu)}{2\gamma}=-\frac{M_1}{M_2}.$$

Мы получаем, что атомы в каждой ячейке движутся в противофазе. Причем, амплитуда движения легкого атома больше амплитуды тяжелого атома в M_2/M_1 раз.

Задача 13.2. Каково отличие между акустической и оптической ветвями на границе зоны Бриллюэна?

Решение. Согласно следующим формулам:

$$(2\gamma-M_1\omega^2)A-\gamma\left(e^{ika}+1\right)B=0,$$
$$\gamma\left(e^{-ika}+1\right)A+(2\gamma-M_2\omega^2)B=0$$

и

$$\frac{B}{A} = \frac{2\gamma - M_1\omega^2}{\gamma(e^{ika} + 1)}.$$

найдем отношение амплитуд колебаний легкого и тяжелого атомов:

$$\frac{A}{B} = \frac{\gamma(e^{ika} + 1)}{2\gamma - M_1\omega^2}.$$

а) Для акустической ветви, на границе зоны Бриллюэна

$$\frac{A}{B} = \frac{\gamma(e^{i\pi} + 1)}{2\gamma - M_1\omega^2} = 0.$$

Это значит, что легкие атомы совсем не колеблются, а колеблются только тяжелые с массой M_2. б) Для оптической ветви на границе зоны Бриллюэна, согласно следующей формуле

$$\omega^2\left(\frac{\pi}{a}\right) = \frac{\gamma}{\mu} + \sqrt{\frac{\gamma^2}{\mu^2} - \frac{4\gamma^2}{M_1 M_2}} = \frac{2\gamma}{M_1},$$

имеем

$$\omega^2\left(\frac{\pi}{a}\right) = \frac{2\gamma}{M_2},$$

следовательно, $B = 0$. В результате, в случае оптических колебаний при $k = \frac{\pi}{a}$ колеблются легкие атомы, а тяжелые стоят на месте.

Задача 13.3. Найти скорость звука для акустических колебаний в длинноволновом пределе.

Решение. Согласно следующим формулам:

$$\omega^2 = \frac{\gamma}{\mu}(1 \pm \sqrt{1 - \frac{4\mu^2}{M_1 M_2}\sin^2(\frac{ka}{2})})$$

и

$$\omega^2(k) \approx \frac{\gamma}{\mu}\left[1 - \sqrt{1 - \frac{4\mu^2}{M_1 M_2}\left(\frac{ka}{2}\right)^2}\right] \approx$$

$$\approx \frac{\gamma}{\mu}\left[1 - (1 - \frac{2\mu^2}{M_1 M_2}\left(\frac{ka}{2}\right)^2)\right] =$$

$$= \frac{2\mu\gamma}{M_1 M_2}\left(\frac{ka}{2}\right)^2 = a^2\frac{\gamma}{2(M_1 + M_2)}k^2,$$

получаем, что при $ka \ll 1$

$$\omega^2(k) \approx \frac{2\mu\gamma}{M_1 M_2}\left(\frac{ka}{2}\right)^2 = a^2\frac{\gamma}{2(M_1 + M_2)}k^2.$$

Следовательно, скорость звука s равна

$$s = a\sqrt{\frac{\gamma}{2(M_1 + M_2)}}.$$

Задача 13.4. Найти плотность состояний оптических и акустических колебаний в длинноволновой области спектра ($ka \ll 1$).

Решение. Для случая, когда есть два атома в элементарной ячейке, мы имеем:

1) одну продольную акустическую ветвь LA,
2) две поперечные акустические ветви TA,
3) одну продольную оптическую ветвь LO,
4) две поперечные оптические ветви TO.

При $ka \ll 1$, согласно

$$\omega^2(k) \approx \frac{\gamma}{\mu}\left[1 - \sqrt{1 - \frac{4\mu^2}{M_1M_2}\left(\frac{ka}{2}\right)^2}\right] \approx$$

$$\approx \frac{\gamma}{\mu}\left[1 - (1 - \frac{2\mu^2}{M_1M_2}\left(\frac{ka}{2}\right)^2)\right] =$$

$$= \frac{2\mu\gamma}{M_1M_2}\left(\frac{ka}{2}\right)^2 =$$

$$= a^2\frac{\gamma}{2(M_1 + M_2)}k^2,$$

имеем

$$\omega_{ak} = a\sqrt{\frac{\gamma}{2(M_1 + M_2)}}k = sk.$$

Аналогично для оптической ветви при $ka \ll 1$ имеем

$$\omega_{opt} = \sqrt{\frac{2\gamma}{\mu}}\left(1 - \frac{\mu^2}{8M_1M_2}k^2a^2\right) = \omega_0\left(1 - \frac{M_1M_2}{8(M_1+M_2)^2}k^2a^2\right),$$

где $\omega_0 = \sqrt{\frac{2\gamma}{\mu}}$.

Трехмерная плотность состояний равна

$$p^{3D}(\epsilon) = \frac{k^2}{2\pi^2\left|\frac{d\epsilon}{dk}\right|}.$$

Аналогично одномерная плотность состояний равна

$$p^{1D}(\epsilon) = \frac{1}{\pi\left|\frac{d\epsilon}{dk}\right|}.$$

В результате, для акустических фононов в длинноволновом пределе получаем

$$p_{ak}^{3D} = \frac{\epsilon^2}{2\pi^2(s\hbar)^3};\ p_{ak}^{1D} = \frac{1}{\pi s\hbar} = \text{const.}$$

Здесь $\epsilon = \hbar\omega$.

Аналогично для оптических фононов в длинноволновом пределе находим

$$p_{opt}^{3D} = \frac{4\sqrt{2}(M_1+M_2)^3}{\pi^2 a^3 (M_1 M_2)^{3/2}\epsilon_0}(1-\frac{\epsilon}{\epsilon_0})^{1/2},$$

$$p_{opt}^{1D} = \frac{2\sqrt{2}(M_1+M_2)}{\sqrt{2}\pi(M_1M_2)^{1/2}a\epsilon_0}\frac{1}{(1-\frac{\epsilon}{\epsilon_0})^{1/2}},$$

где $\epsilon_0 = \hbar\omega_0$.

Задача 13.5. Оцените, какую энергию имеет нейтрон с длиной волны де Бройля порядка постоянной решетки?

Ответ:

$$\epsilon_H = \frac{\hbar^2 k^2}{2M} = \frac{\hbar^2}{2M}\frac{4\pi^2}{\lambda^2} \approx 10^{-13}\text{эрг} \approx 0{,}1\ \text{эВ}.$$

14. Электроны в идеальном кристалле

Теорема Блоха устанавливает вид волновой функции частицы, которая находится в периодическом потенциале $u(\vec{r})$:

$$\psi_{n\vec{k}} = e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{n\vec{k}}(\vec{r}),$$

где $\psi_{n\vec{k}}$ – волновая функция частицы, $u_{n\vec{k}}(\vec{r})$ – блоховская амплитуда.

$$u_{n\vec{k}}(\vec{r}+\vec{R}) = u_{n\vec{k}}(\vec{r}).$$

Электронные состояния в периодическом поле определяются двумя квантовыми числами: n и $\vec{k}$. Одно квантовое число непрерывное – это волновой вектор $\vec{k}$, второе принимает дискретные значения – это номер зоны n.

Наличие периодического потенциала приводит к появлению чередования разрешенных и запрещенных зон энергии для электрона в кристалле [8].

Задача 14.1. Написать второй закон Ньютона в проекциях (не в векторной форме) для следующего спектра:

$$E_k = E_0 + \frac{\hbar^2}{2}\left\{\frac{(k_{x'}-k_{x'0})^2}{m_x} + \frac{(k_{y'}-k_{y'0})^2}{m_y} + \frac{(k_{z'}-k_{z'0})^2}{m_z}\right\}.$$

Найти скорость v_x, v_y, v_z.

Задача 14.2. В приближении сильной связи найти спектр полупроводника с простой кубической решеткой, считая, что орбитали, из которых формируются зонные состояния, имеют симметрию *S* типа.

Решение. Согласно методу сильной связи, энергетический спектр электрона определяется соотношением

$$\mathrm{E(k)} = \mathrm{E}_0 - C - \sum_{n_0} A_{n_0} e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}_{\mathbf{n}_0}},$$

где E_0 — энергия электрона на данном узле, векторы $\mathbf{n}_0$ нумеруют атомы первой координационной сферы данного узла; $\mathbf{a}_{\mathbf{n}_0}$ — соответствующие векторы решетки, и C — сдвиг энергии, обусловленный отличием атомного потенциала от самосогласованного потенциала решетки. Константы $A_{\mathbf{n}_0}$ — интегралы перекрытия данного узла и соседних.

Если состояния обладают сферической симметрией, то $A_{\mathbf{n}_0}$ зависит лишь от расстояния между данным атомом и атомом на координационной сфере, т. е. $A_{n_0} = A$ (не зависит от $\mathbf{n}_0$). В простой кубической решетке у каждого атома 6 соседей. Если оси x, y и z направлены по кубическим осям, то

$$\sum_{\mathbf{n}_0} A_{\mathbf{n}_0} e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}_{n_0}} = A_{\mathbf{n}_0} \sum_{\mathbf{n}_0} e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}_{n_0}} = 2A\big(\cos(ka_x) + \cos(ka_y) + \cos(ka_z)\big),$$

где a — постоянная решетки. Окончательно получаем,

$$\mathrm{E(k)} = \mathrm{E}_0 - C - 2A\big(\cos(ka_x) + \cos(ka_y) + \cos(ka_z)\big).$$

15. Статистика электронов и дырок в полупроводниках

Среднее число электронов f в данном квантовом состоянии в термодинамическом равновесии зависит только от энергии электронов и выражается формулой Ферми-Дирака:

$$f = \frac{1}{\exp\left(\frac{E-\mu}{k_B T}\right) + 1},$$

где E – энергия электрона, μ – химический потенциал, k_B – постоянная Больцмана. При $T = 0$ химический потенциал равен энергии Ферми ε_F, которая в полупроводниках находится в запрещенной зоне. Функция $f(E)$ называется функцией распределения Ферми-Дирака. График этой функции представлен на рисунке 15. При температуре $T = 0$ (кривая 1) – это «ступенька». При температуре, отличной от нуля ($T \neq 0$), график функции $f(E)$ (ступенька) размывается (кривая 2). Это размытие по энергии происходит на ширине $k_B T$ [8].

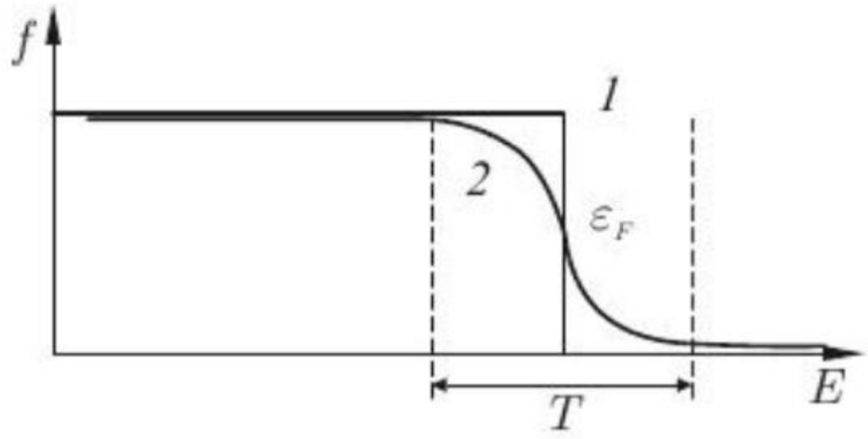


Рисунок 15 – Функция распределения Ферми-Дирака $f(E)$. При $T = 0$ это «ступенчатая» функция (кривая 1), при конечной температуре T ступенька имеет размытие порядка $k_B T$ (кривая 2). При $T = 0$ химический потенциал совпадает с энергией Ферми ε_F

Задача 15.1. Получить выражение для эффективного числа состояний электронов в зоне проводимости N_c для эллипсоидального закона дисперсии.

Решение. Для эллипсоидального закона дисперсии имеем

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2}\left[\frac{{k_x}^2}{m_1} + \frac{{k_y}^2}{m_2} + \frac{{k_z}^2}{m_3}\right].$$

Это выражение можно переписать в виде

$$\frac{{k_x}^2}{a^2} + \frac{{k_y}^2}{b^2} + \frac{{k_z}^2}{c^2} = 1.$$

Здесь $a = (\frac{2m_1\epsilon}{\hbar^2})^{1/2}, b = (\frac{2m_2\epsilon}{\hbar^2})^{1/2}, c = (\frac{2m_3\epsilon}{\hbar^2})^{1/2}$ – полуоси эллипсоида в **k** –пространстве. Тогда объем эллипсоида равен

$$V = \frac{4}{3}\pi abc = \frac{4}{3}\frac{\pi}{\hbar^3}(8m_1m_2m_3)^{1/2}\epsilon^{3/2}.$$

Объем одного слоя между двумя эллипсоидальными изоэнергетическими поверхностями, согласно предыдущей формуле, равен

$$dV = \frac{2\pi}{\hbar^3}(8m_1m_2m_3)^{1/2}\epsilon^{1/2}d\epsilon.$$

Тогда число состояний в единицу объема имеет вид

$$dp = \frac{dV}{(2\pi)^3}n = \frac{n}{(2\pi)\hbar^3}(8m_1m_2m_3)^{1/2}\epsilon^{1/2}d\epsilon,$$

где n — число долин. Подставляя полученную формулу в

$$\mathrm{N}_c = \int_0^\infty \exp\left(-\frac{\epsilon_c}{k_B T}\right)p(\epsilon_c)d\epsilon_c,$$

получаем:

$$\mathrm{N}_c = 2(\frac{k_B T m_d}{2\pi\hbar^2})^{3/2}n,$$

где $m_d = (8m_1m_2m_3)^{1/3}$ — эффективная масса плотности состояний. Например, для кремния $m_d = (m_{\parallel}m_{\perp}^2)^{1/3}$, где $m_{\parallel}$ и $m_{\perp}$ — это продольная и поперечная массы.

Задача 15.2. Получить выражение для эффективного числа состояний в валентной зоне N_v для тяжелых и легких дырок. *Примечание*. Если зоны перекрываются, то плотность состояний равна сумме плотностей состояний отдельных зон.

Решение. Так как для вычисления N_v нужно знать плотность состояний $p(\epsilon_k)$, то в случае двух пересекающихся зон

$$p(\epsilon_k) = p_h(\epsilon_v) + p_l(\epsilon_v),$$

где $p_h(\epsilon_v)$ и $p_l(\epsilon_v)$ — плотности тяжелых и легких дырок соответственно. Аппроксимируя спектр тяжелых и легких дырок (вблизи максимума) параболой, получаем, что эффективное число состояний N_v состоит из двух слагаемых, происходящих от двух слагаемых в $p(\epsilon_k)$ (см. формулу выше). Используя определение N_v, для случая формулы выше окончательно получаем

$$\mathrm{N}_v = 2(\frac{k_B T}{2\pi\hbar})^{3/2}\left(m_h^{3/2} m_l^{3/2}\right).$$

Здесь m_h и m_l — эффективные массы тяжелых и легких дырок соответственно.

Задача 15.3. Получить выражение для плотности состояний $p(\epsilon)$ для электронов с кейновским законом дисперсии

$$\mathrm{E}_c = \sqrt{(\frac{E_g}{2}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c} E_g} - \frac{E_g}{2}.$$

Решение. Для нахождения плотности состояний воспользуемся следующим выражением:

$$p(\epsilon) = \lim_{\Delta\epsilon \to \infty} \frac{4\pi k^2}{(2\pi)^3} \frac{\Delta \mathrm{k}}{\Delta\epsilon} = \frac{k^2}{2\pi^2 (d\epsilon/dk)}.$$

Выразим k^2 через энергию E_c:

$$k^2 = \frac{2m_c}{\hbar^2} \frac{E_c(E_c + E_g)}{E_g}.$$

Производная dE_c/dk легко находится из первой формулы. Подставим k^2 из предыдущей формулы и (dE_c/dk) в формулу для $p(\epsilon)$. Тогда, окончательно, для плотности состояний получаем

$$p_c(E_c) = \frac{1}{2\pi^2} (\frac{2m_c}{\hbar^2})^{3/2} \left\{E_c(1 + \frac{E_c}{E_g}) \left[\frac{1}{4} + \frac{E_c}{E_g}(1 + \frac{E_c}{E_g})\right]\right\}^{1/2}.$$

Для малых значений энергии, когда $E_c \ll E_g$, получаем выражение

$$p_c(E_c) = \frac{1}{4\pi^2} (\frac{2m_c}{\hbar^2})^{3/2} {E_c}^{1/2}.$$

Спиновое вырождение не учитывается.

Задача 15.4. Выразить энергию Ферми через концентрацию электронов E_F для случая параболического закона дисперсии.

Решение. Воспользуемся выражением для концентрации электронов:

$$n = 2\int_0^\infty f(\epsilon)g(\epsilon)d\epsilon.$$

Плотность состояний для сферического закона дисперсии имеет вид

$$g(\epsilon) = \frac{\sqrt{2}}{2\pi^2}\frac{m^{3/2}}{\hbar^3}\epsilon^{1/2}.$$

Тогда для концентрации электронов найдем

$$n = \frac{2\sqrt{2}}{\pi^2}\frac{m^{3/2}}{\hbar^3}\int_0^\infty \frac{\epsilon^{1/2}d\epsilon}{\exp\left(\frac{\epsilon-\mu}{k_BT}\right)+1}.$$

Будем считать, что электроны сильно вырождены, тогда функцию распределения $f(\epsilon)$ можно заменить ступенькой. При этом максимальное значение энергии равно E_F. Тогда выражение принимает вид

$$n = \frac{2\sqrt{2}}{\pi^2}\frac{m^{3/2}}{\hbar^3}\int_0^{E_F} \epsilon^{1/2}d\epsilon = \frac{(2m)^{3/2}}{2\pi^2\hbar^3}{E_F}^{3/2}.$$

В результате

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m}(3\pi n)^{2/3}.$$

Задача 15.5. Показать, что условие $K \geq U$, когда кинетическая энергия электрона больше потенциальной энергии взаимодействия с полем донора, соответствует критерию сильного легирования Мотта:

$$na_D^3 \geq \frac{8}{(3\pi^2)^2} = 0{,}01.$$

Кинетическая энергия электрона K порядка энергии Ферми E_F:

$$K \sim E_F = \frac{\hbar^2}{2m}(3\pi^2 n)^{2/3}.$$

Потенциальную энергию электрона можно оценить следующим образом:

$$U = \frac{e^2}{\kappa r}.$$

Здесь r — расстояние до ближайшего центра. Поэтому, зная концентрацию примесей N, можно оценить среднее расстояние как

$$r \sim N^{-1/3}.$$

В случае сильного легирования концентрация электронов равна концентрации примесей, так как все примеси ионизованы. Тогда, подставляя явные выражения для K и U через n в неравенство $K \geq U$, получаем

$$\frac{\hbar^2}{2m}(3\pi^2)^{2/3}n^{1/3} \geq \frac{e^2}{\kappa}.$$

Введем боровский радиус донора

$$a_D = \frac{\kappa\hbar^2}{me^2}.$$

В результате выражение принимает вид

$$na_D^3 \geq \frac{8}{(3\pi^2)^2} \sim 0{,}01.$$

Задача 15.6. Какова плотность состояний *D(E)* в полупроводнике с законом дисперсии

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}(1 - \gamma k^2).$$

Указание. Воспользуйтесь соотношением

$$\frac{V}{2\pi^2}k^2 dk = D(E)dE,$$

где V — нормировочный объем. Спиновое вырождение не учитывается.

16. Кинетические явления в полупроводниках

Задача 16.1. Есть две долины, одна ориентирована вдоль оси x, другая — вдоль оси y. К кристаллу приложена одноосная деформация вдоль оси x. Найти отношение концентраций в долинах в зависимости от величины относительного сдвига долин ΔE. Оценить значение относительного сдвига долин, при котором относительная концентрация в долинах изменится в 2 раза [8].

Решение. Уровень Ферми для обеих зон одинаков. Концентрация электронов в первой долине равна: $n_1 = N_c \exp\left(-\frac{\chi_{c_1}}{k_B T}\right)$, где χ_{c_1} — расстояние по энергии от уровня Ферми до дна зоны проводимости первой долины. Во второй долине: $n_2 = N_c \exp\left(-\frac{\chi_{c_2}}{k_B T}\right)$, где χ_{c_2} — расстояние от уровня Ферми до дна зоны проводимости второй долины. Поскольку при деформации первая долина сместится вниз по энергии на величину ΔE, то

$$\chi_{c_2} = \chi_{c_1} + \Delta E.$$

Следовательно,

$$\frac{n_1}{n_2} = \left(\frac{m_{c_1}}{m_{c_2}}\right)\exp\left(\frac{\Delta E}{k_B T}\right).$$

Если относительная концентрация в долинах изменилась в 2 раза, то сдвиг энергии при этом равен: $\Delta\epsilon = k_B T \ln 2$.

Задача 16.2. Предположим, что относительный сдвиг долин при одноосной деформации ΔE пропорционален величине деформации $\epsilon, \Delta E = \alpha\epsilon$, где α — коэффициент, имеющий размерность энергии, и $\alpha \sim$ 1–10 эВ. Найти зависимость относительного изменения удельного сопротивления $\Delta p/p$ от ϵ для Si. Нарисовать схематически график зависимости $\Delta p/p_0$ от ϵ. Давление и электрическое поле приложены по оси $\langle 100 \rangle$.

Решение. Чтобы найти $\Delta p/p_0$ за счет деформации, нужно найти проводимость σ, так как $p = 1/\sigma$. Поскольку и давление, и электрическое поле приложены по оси $\langle 100\rangle$, то для Si согласно следующей формуле:

$$\mathbf{j} = \frac{ne}{3}(v_1 + v_2 + v_3)$$

ток равен: $j_x = \frac{e}{3}(n_1 v_{1x} + n_2 v_{2x} + n_3 v_{3x})$. Так как вторая и третья долины расположены по осям y и z, то в них $n_2 = n_3$. Согласно предыдущей задаче

$$n_1 = n_2 \exp\left(\frac{\Delta E}{k_B T}\right) = n_2 \exp\left(\frac{\alpha\epsilon}{k_B T}\right).$$

В результате

$$\sigma = \frac{ne^2 r}{3}\left[\frac{2}{m_\perp} + \frac{\exp(\alpha\epsilon/k_B T)}{m_\parallel}\right].$$

Окончательно:

$$\frac{\Delta p}{p} = \frac{p_0 - p}{p_0} = \frac{m_\perp[\exp(\alpha\epsilon/k_B T) - 1]}{2m_\parallel + m_\perp \exp(\alpha\epsilon/k_B T)}.$$

Здесь мы учли, что $p_0 = 1/\sigma_0 = \frac{3m_\perp m_\parallel}{ne^2 r(2m_\parallel + m_\perp)}$ (см. $\sigma = \frac{ne^2 r}{3}(\frac{2}{m_\perp} + \frac{1}{m_\parallel})$). (6.30)). Схематическая зависимость $\Delta p/p_0$ от величины деформации ϵ представлена на рисунке 16.

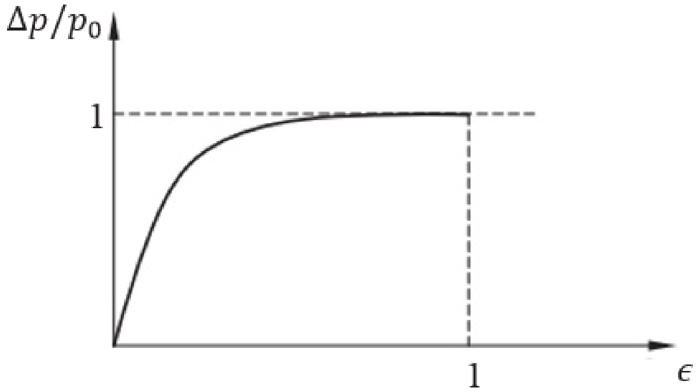


Рисунок 16 – Зависимость относительного изменения удельного сопротивления $\Delta p/p_0$ от величины деформации ϵ

Задача 16.3. Показать исходя из законов сохранения энергии и импульса, что если энергия электрона $E \ll ms^2$, то в этом случае электрон не может испускать фононы.

Решение. Запишем законы сохранения энергии и импульса для процесса испускания фонона: $\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 (k')^2}{2m} + \hbar s q, \mathbf{k} = \mathbf{k}' + \mathbf{q}$. Решая эту систему уравнений, получаем $ms^2 = 2E\cos^2\alpha$, где $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, α – угол между $\mathbf{k}'$ и $\mathbf{q}$. Поскольку $\cos^2\alpha \le 1$, то $ms^2 \le 2E$. Таким образом, для излучения фононов энергия электрона E должна быть больше ms^2.

Задача 16.4. Выяснить, какой порядок величины имеет дрейфовая скорость электрона, когда начинается существенный разогрев. Считать, что рассеяние электронов происходит на акустических фононах.

Задача 16.5. Найти транспортное время релаксации электронов при рассеянии на примесях, описываемых потенциалом $U(\mathbf{r}) = U_0\delta(\mathbf{r})$. Отличается ли транспортное сечение рассеяния от полного? Почему?

Указание. Воспользуйтесь следующим уравнением:

$$\frac{1}{\tau} = \sum_{\mathbf{p}'} W(\mathbf{p}, \mathbf{p}')(1 - \cos\Theta).$$

Для расчета $W(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ используйте борновское приближение $W(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = \frac{2\pi}{\hbar} V_{\mathbf{pp}'}\delta\left(E_p E_{p'}\right)$.

17. Поведение избыточных (неравновесных) носителей заряда в полупроводниках

Задача 17.1. Найти отношение концентраций электрона в побочной долине L к основной долине Γ $(n_L/n_\Gamma - ?)$

Решение. Имеем:

$$n_\Gamma = N_c^\Gamma \exp\left(-\frac{\mathrm{X}_c^\Gamma}{k_B T_e^\Gamma}\right),$$

$$n_L = N_c^L \exp\left(-\frac{\mathrm{X}_c^L}{k_B T_e^L}\right),$$

где $\mathrm{X}_c^L = \mathrm{X}_c^\Gamma + \Delta E, \mathrm{X}_c^\Gamma$ — расстояние от уровня химического потенциала до дна зоны проводимости.

$$k_B T_e^i = k_B T + m^i(\mu^i E)^{2a},$$

где $i = \Gamma, L$;

$$N_c^i = 2(\frac{m_c^i T_e^i}{2\pi\hbar^2})^{3/2}.$$

Получаем:

$$\frac{n_L}{n_\Gamma} = \left(\frac{m_c^L T_e^L}{m_c^\Gamma T_e^\Gamma}\right) \exp\left(-\frac{\Delta E}{k_B T_e^L} + \frac{\mathrm{X}_c^\Gamma}{k_B}(\frac{1}{T_e^\Gamma} - \frac{1}{T_e^L})\right).$$

18. Оптические свойства полупроводников

Задача 18.1. Рассмотреть межзонное поглощение света в квантовой яме с бесконечными барьерами. Получить зависимость коэффициента поглощения света от частоты α(ω). Установить, как эта зависимость переходит в α(ω) $\propto \sqrt{\hbar\omega - E_g}$.

Указание. Легко убедиться, что если барьеры в квантовой яме бесконечны, то при межзонных переходах возбуждаются электроны и дырки на одинаковых уровнях размерного квантования. Плотность состояний в каждой подзоне размерного квантования постоянна. Зависимость коэффициента поглощения от энергии будет представлять собой набор ступенек на энергиях $\hbar^2 k^2/2\mu$, где μ — приведенная масса электрона и дырки [8].

Задача 18.2. Установить правила отбора при межзонных и межподзонных переходах в квантовой яме с бесконечно высокими барьерами для электронов и дырок (свет падает по нормали к структуре).

Задача 18.3. Установить зависимость коэффициента поглощения света от частоты α(ω) вблизи края поглощения для:

1) прямых разрешенных переходов;

2) прямых запрещенных переходов.

Ответ.

1. α(ω) $\propto \sqrt{\hbar\omega - E_g}$;

2. α(ω) $\propto (\hbar\omega - E_g)^{3/2}$.

Задача 18.4. Какова частотная зависимость коэффициента поглощения света α(ω) при $\hbar\omega > E_g$ в условиях эффекта Келдыша–Франца (см. п.8.7 из учебника [8]).

19. Кинетические явления в полупроводниках в магнитном поле

Задача 19.1. Установите правила отбора квантовых переходов в условиях циклотронного резонанса в случае параболического спектра.

Ответ. Разрешены переходы между соседними уровнями Ландау (то есть между уровнями с номерами n и n + 1 при поглощении кванта и n и n − 1 при излучении).

Задача 19.2. Получите выражения для тензора проводимости в магнитном поле из кинетического уравнения.

Указание. Представьте функцию распределения в виде $f_0 + f_1$, где f_1 — неравновесная добавка, обусловленная наличием электрического и магнитного полей. Эта поправка удовлетворяет уравнению

$$-e\mathbf{E}\frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}} - \frac{e}{c}[\mathbf{vH}]\frac{\partial f_1}{\partial \mathbf{p}} = -\frac{f_1(\mathbf{p})}{\tau}.$$

Решение этого уравнения удобно искать в виде

$$f_1(\mathbf{p}) = \frac{\partial f_0}{\partial E}\mathbf{A}(E)\mathbf{p},$$

где **A** — некоторый вектор, который зависит только от энергии электрона *E*. Направление этого вектора фиксировано.

Задача 19.3. Хорошо известно, что при протекании электрического тока поле совершает работу над электронами. Это должно приводить к постоянному увеличению их кинетической энергии. Почему этим явлением пренебрегают при рассмотрении кинетических явлений? Какие процессы ответственны за установление стационарного распределения носителей? Оцените величину разогрева электронного газа. Меняется ли этот баланс энергий в магнитном поле? [8]

Указание. Энергия, получаемая электронами от поля, частично уходит в решетку за счет взаимодействия электронов с фононами.

Задача 19.4. Пусть электрон совершает диффузионное движение в неупорядоченной среде. Известно, что квантовая (интерференционная) поправка к проводимости пропорциональна вероятности возврата электрона в окрестность начальной точки размером порядка длины волны. Оцените квантовую поправку к проводимости для электрона в объемном полупроводнике.

Решение. Найдем вероятность того, что в интервале времени (t,t + dt), где t — время, отсчитанное от начала движения, электрон вернется в исходную точку. Ясно, что за время t объем, охваченный траекторией, будет порядка

$$V(t) \sim (Dt)^{3/2}.$$

Здесь D — коэффициент диффузии, $\sqrt{Dt}$ — характерное смещение электрона. За время dt электрон вернется в требуемую окрестность из объема

$$dV \sim \frac{v dt}{k^2},$$

где v — скорость электрона; k — его волновой вектор. Искомая вероятность возврата есть dV/V, а полная вероятность возврата, которой пропорциональна относительная поправка к проводимости, есть

$$\frac{\delta\sigma}{\sigma} \sim \int \frac{dV}{V} = \int \frac{v dt}{k^2 (Dt)^{3/2}}.$$

Этот интеграл расходится на нижнем пределе. Очевидно, однако, что диффузионное описание верно лишь на временах, больших чем время столкновений τ, поэтому в качестве нижнего предела интеграла нужно выбрать τ. Кроме того, слишком длинные траектории не могут давать вклада в интерференцию, поскольку неизбежны процессы неупругого рассеяния, которые меняют энергию электрона, а значит, и его фазу. Такие процессы нарушают интерференцию. Эти процессы называются процессами сбоя фазы и характеризуются временем τ_φ. Окончательно,

$$\frac{\delta\sigma}{\sigma} \sim -\frac{1}{k^2 l}\left(\frac{1}{v\tau} - \frac{1}{\sqrt{D\tau_\varphi}}\right) < 0.$$

Список использованной и рекомендованной литературы

[1] Ландау, Л.Д. Теоретическая физика. В 10 т. Т. I. Механика [Электронный ресурс] : учебное пособие / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. — Электрон. дан. — Москва : Физматлит, 2007. — 224 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/2231. — Загл. с экрана.
[2] Блохинцев, Д.И. Основы квантовой механики [Электронный ресурс] : учебное пособие / Д.И. Блохинцев. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2004. — 672 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/619. — Загл. с экрана.
[3] Ландау, Л.Д. Теоретическая физика Т.3. Квантовая механика (нерелятивистская теория) [Электронный ресурс] / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. — Электрон. дан. — Москва : Физматлит, 2001. — 808 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/2380. — Загл. с экрана.
[4] Иродов, И.Е. Задачи по квантовой физике [Электронный ресурс] : учебное пособие / И.Е. Иродов. — Электрон. дан. — Москва : Издательство "Лаборатория знаний", 2015. — 220 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/84093. — Загл. с экрана.
[5] Бронштейн, И.Н. Справочник по математике для инженеров и учащихся втузов [Электронный ресурс] : справочник / И.Н. Бронштейн, К.А. Семендяев. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2010. — 608 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/678. — Загл. с экрана.
[6] Ансельм, А.И. Введение в теорию полупроводников [Электронный ресурс] : учебное пособие / А.И. Ансельм. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2016. — 624 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/71742. — Загл. с экрана.
[7] Фейнман, Р. Задачи к Фейнмановским лекциям по физике [Электронный ресурс] : учебное пособие / Р. Фейнман, Р. Лейтон, М. Сэндс ; под ред. Готтлиба М.А., Пфайффера Р. ; пер. с англ. Иванова С.А.. — Электрон. дан. — Москва : Издательство "Лаборатория знаний", 2016. — 402 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/90250. — Загл. с экрана.
[8] Зегря, Г.Г. Основы физики полупроводников [Электронный ресурс] : учебное пособие / Г.Г. Зегря, В.И. Перель. — Электрон. дан. — Москва : Физматлит, 2009. — 336 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/2371. — Загл. с экрана.
[9] Дьяконов М.И. Методические указания к практическим занятиям по курсу «Квантовая механика» / Ленинград, 1982.

Приложение I

а) Сферические координаты

$$r = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}, \qquad \cos\Theta = \mathrm{z/r}, \qquad \mathrm{tg}\varphi = y/x,$$

$$x = r\sin\Theta\cos\Theta, \qquad \mathrm{y} = r\sin\Theta\sin\Theta, \qquad \mathrm{z} = \mathrm{r}\cos\Theta,$$

$$0 < \varphi < 2\pi, \qquad 0 < \Theta < \pi, \qquad 0 < \mathrm{r} < \infty.$$

Элемент объема: $dV = r^2 dr\sin\Theta d\Theta d\varphi$.

Оператор Лапласа: $\Delta f = \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(rf) - \frac{\widehat{L^2}}{z^2}f$, где $\widehat{L^2} = \frac{1}{\sin\Theta}\cdot\frac{\partial}{\partial\Theta}\left(\sin\Theta\frac{\partial}{\partial\Theta}\right) - \frac{1}{\sin^2\Theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$ — оператор квадрата углового момента.

б) Сферические функции $Y_{lm}(\Theta, \varphi)$.

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}};\ Y_{10} = (\frac{3}{4\pi})^{1/2}\cos\Theta;\ Y_{1,\pm1} = \mp\left(\frac{3}{8\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\sin\Theta e^{\pm i\varphi}.$$

Нормировка: $\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin\Theta \mathrm{d}\Theta\, |Y_{lm}(\Theta, \varphi)|^2 = 1$.

в) Некоторые часто встречающиеся интегралы

$$\int_0^\infty x^n e^{-x} dx = n!;\ \int_0^\infty e^{-x^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2};\ \int_0^\infty x^2 e^{-x^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{4};\ \int_0^\infty x^4 e^{-x^2} dx = \frac{3\sqrt{\pi}}{8}$$

г) Радиальные функции в атоме водорода $R_{nl}(r)$:

$$R_{10} = \frac{2}{{a_0}^{3/2}} e^{-r/a_0};\ R_{20} = \frac{1}{{a_0}^{3/2}\sqrt{2}} e^{-r/2a_0};\ R_{21} = \frac{1}{{a_0}^{3/2} 2\sqrt{6}}\frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0}.$$

Нормировка: $\int_0^\infty r^2 dr\, |R_{nl}(r)|^2 = 1$.

д) Первые волновые функции гармонического осциллятора

$$\Psi_0 = (\alpha/\pi)^{1/4} e^{-\xi^2/2}, \Psi_1 = (4\alpha/\pi)^{1/4} \xi e^{-\xi^2/2}, \Psi_2 = \left(\frac{\alpha}{4\pi}\right)^{\frac{1}{4}} (1 - 2\xi^2) e^{-\frac{\xi^2}{2}},$$

где $\xi = \alpha^{1/2} x, \alpha = m\omega/\hbar$.

Приложение II

Численные значения некоторых физических величин.

Постоянная Планка	$\hbar = 1.05 \cdot 10^{-27}$эрг $\cdot$ с $= 1.05 \cdot 10^{-34}$Дж $\cdot$ с
Заряд электрона	$e = 4.8 \cdot 10^{-10}$см$^{3/2}$гр$^{1/2}$с$^{-1}$ $= 1.6 \cdot 10^{-19}$Кл
Масса электрона	$m = 9.1 \cdot 10^{-28}$гр $= 9.1 \cdot 10^{-31}$кг
Масса протона	$M = 1.7 \cdot 10^{-24}$гр $= 1.7 \cdot 10^{-27}$кг
Скорость света	$c = 3 \cdot 10^{10}$см/с $= 3 \cdot 10^{8}$м/с
Постоянная Больцмана	$k = 1.4 \cdot 10^{-16}$эрг/град $= 1.4 \cdot 10^{-23}$Дж/град

$$1 \text{ эВ} = 1.6 \cdot 10^{-12} \text{эрг} = 1.6 \cdot 10^{-19} \text{Дж.}$$

Зегря Георгий Георгиевич
Векслер Михаил Исаакович
Смирнова Ирина Геннадьевна
Устинова Ирина Александровна

Задачи по квантовой механике

Учебно-методическое пособие

В авторской редакции
Редакционно-издательский отдел Университета ИТМО
Зав. РИО Н.Ф. Гусарова
Подписано к печати
Заказ №
Отпечатано на ризографе

Редакционно-издательский отдел
Университета ИТМО
197101, Санкт-Петербург, Кронверкский пр., 49