БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАТИКИ И РАДИОЭЛЕКТРОНИКИ

КАФЕДРА МИКРО- И НАНОЭЛЕКТРОНИКИ

И. И. Абрамов

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА. ВОПРОСЫ И ОТВЕТЫ

Учебно-методическое пособие

МИНСК 2007

Министерство образования Республики Беларусь
Учреждение образования
«Белорусский государственный университет
информатики и радиоэлектроники»

Кафедра микро- и наноэлектроники

И. И. Абрамов

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА. ВОПРОСЫ И ОТВЕТЫ

Учебно-методическое пособие

по дисциплине
«Квантовая механика и статистическая физика»
для студентов специальностей
I-41 01 03 «Квантовые информационные системы»
и I-41 01 02 «Микро- и наноэлектронные технологии и системы»
всех форм обучения

Минск 2007

УДК 530.145.6+519.25 (075.8)
ББК 22.314+22.317 я 73
А 16

Рецензент
профессор кафедры физики полупроводников и наноэлектроники БГУ,
доктор физико-математических наук, профессор Н.А. Поклонский

Абрамов, И. И.

А 16 Квантовая механика. Вопросы и ответы : учебно-метод. пособие по дисц. «Квантовая механика и статистическая физика» для студ. спец. I-41 01 03 «Квантовые информационные системы» и I-41 01 02 «Микро- и наноэлектронные технологии и системы» всех форм обуч. / И. И. Абрамов. – Минск : БГУИР, 2007. – 42 с. : ил.

ISBN 978-985-488-165-2

В пособии приведены основные контрольные вопросы и даны в конспективной форме ответы по квантовой механике.

Издание целесообразно использовать в качестве дополнения к лекциям и учебным пособиям, предназначается для студентов II курса, обучающихся по специальностям I-41 01 03 «Квантовые информационные системы» и I-41 01 02 «Микро- и наноэлектронные технологии и системы», а также может быть полезно студентам других курсов, магистрантам и аспирантам соответствующих специальностей.

УДК 530.145.6+519.25 (075.8)
ББК 22.314+22.317 я 73

ISBN 978-985-488-165-2

Список основных обозначений

$\hbar$ – постоянная Планка, деленная на 2π ($\hbar = 1{,}05 \cdot 10^{-27}$ эрг·с)

x, y, z – пространственные координаты

$\bar{r}$ – радиус-вектор точки пространства

θ – угол между осью 0z и радиусом-вектором $\bar{r}$

φ – угол, отсчитываемый в плоскости xy от оси 0x

t – время

i – мнимая единица (когда не индекс)

δ_{mn} – символ Кронекера

∇ – оператор набла

ψ – волновая функция

$\hat{P}$ и $\hat{X}$ – операторы импульса и координаты x микрочастицы

$\hat{M}$ – оператор момента импульса микрочастицы

$\hat{H}$ – оператор функции Гамильтона (гамильтониан)

μ – масса микрочастицы

e – заряд

c – скорость света

λ – длина волны

$\bar{p}$ – импульс

E – энергия

U – силовая функция

$\bar{H}$ – вектор напряженности магнитного поля

$k_Б$ – постоянная Больцмана

T – температура

ВОПРОСЫ И ОТВЕТЫ

1. Основной предмет изучения квантовой механики.

Ответ: Движение микрочастиц.

2. В чем принципиальное отличие статистической (классической) механики и квантовой механики?

Ответ: В основе статистической (классической) механики лежит ньютоновская механика, допускающая детерминированное описание движения отдельной частицы. В квантовой механике изучаются индивидуальные свойства микрочастиц и индивидуальные микропроцессы с использованием статистических совокупностей – ансамблей.

3. Основные уравнения квантовой теории света.

Ответ: М. Планк открыл закон распределения энергии в спектре излучения абсолютно черного тела, находящегося в тепловом равновесии. В основу закона положено предположение о прерывном характере испускания и поглощения света веществом конечными порциями – квантами света. Энергия кванта ε связана с частотой (циклической) колебаний света ω соотношением

$$\varepsilon = \hbar\omega. \tag{1}$$

Квант света имеет импульс $p = \varepsilon / c$. Введя волновой вектор $\vec{k}$ с компонентами

$$k_x = \frac{2\pi}{\lambda}\cos\alpha,\ k_y = \frac{2\pi}{\lambda}\cos\beta,\ k_z = \frac{2\pi}{\lambda}\cos\gamma, \tag{2}$$

можем записать

$$\vec{p} = \hbar\vec{k}, \tag{3}$$

где λ – длина волны, $\cos\alpha$, $\cos\beta$, $\cos\gamma$ – косинусы нормали к световой волне. Соотношения (1), (3) – основные уравнения квантовой теории света.

4. Законы сохранения энергии и импульса для световых квантов.

Ответ: Взаимодействие кванта света с микросистемой называется «столкновением». Пусть E и $\vec{p}$ – энергия и импульс системы до столкновения с квантом света, E' и $\vec{p}'$ – ее энергия и импульс после столкновения, $\hbar\omega$ и $\hbar\vec{k}$ – энергия и импульс кванта света до столкновения, $\hbar\omega'$ и $\hbar\vec{k}'$ – энергия и импульс кванта света после столкновения. Тогда справедливы следующие законы сохранения энергии и импульса:

$$\hbar\omega + E = \hbar\omega' + E', \tag{4}$$

$$\hbar\vec{k} + \vec{p} = \hbar\vec{k}' + \vec{p}'. \tag{5}$$

Уравнения (4), (5) описывают все три основных процесса: поглощение, испускание и рассеяние света. Если $\omega' = 0$ и $\vec{k}' = 0$, то имеет место поглощение света; если $\omega = 0$ и $\vec{k} = 0$ – испускание света; если все величины $(\omega, \omega', \vec{k}, \vec{k}')$ не равны нулю – рассеяние света.

5. Как называются явления, в которых постоянная Планка играет существенную роль?

Ответ: Они называются квантовыми.

6*. Волна де Бройля и основные уравнения де Бройля.

Ответ: Свободно движущейся микрочастице с энергией E и импульсом $\vec{p}$ Л. де Бройль поставил в соответствие плоскую волну

$$\psi(\vec{r}, t) = Ce^{i(\omega t - \vec{r}\vec{k})}, \tag{6}$$

$$E = \hbar\omega, \tag{7}$$

где C – постоянная, i – мнимая единица, а $\vec{k}$ задается с помощью (3). Соотношения (6), (7), (3) – основные уравнения де Бройля. Используя (3) и (7) в (6), получаем

$$\psi(\vec{r}, t) = Ce^{i(\frac{E}{\hbar}t - \vec{r}\frac{\vec{p}}{\hbar})}. \tag{8}$$

Волну, описываемую (8), называют волной де Бройля.

---

* К данным вопросам имеются дополнительные вопросы, приведенные в конце пособия.

7. Соотношение для длины волны де Бройля.

Ответ: Длина волны де Бройля λ выражается формулой

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2\mu E}}, \qquad (9)$$

где μ – масса микрочастицы, а E – ее энергия.

8. Физическая интерпретация волн де Бройля.

Ответ: М. Борн дал статистическую интерпретацию волн де Бройля: интенсивность волн де Бройля в каком-либо месте пространства пропорциональна вероятности обнаружить микрочастицу в этом месте.

9*. Вероятность нахождения микрочастицы в элементарном объеме.

Ответ: В общем случае волны де Бройля могут представлять более сложные волновые функции от x, y, z и t, а именно:

$$\psi = \psi(x, y, z, t). \qquad (10)$$

Тогда вероятность нахождения микрочастицы в элементарном объеме $d\upsilon = dxdydz$ в окрестности точки x, y, z в момент времени t выражается с помощью

$$dW(x, y, z, t) = |\psi(x, y, z, t)|^2 d\upsilon, \qquad (11)$$

где

$$|\psi(x, y, z, t)|^2 = \psi^*(x, y, z, t)\psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z, t)\psi^*(x, y, z, t). \qquad (12)$$

В (12) учтено, что ψ может быть комплексной величиной. Звездочка обозначает комплексное сопряжение.

10. Условие нормировки волновой функции.

Ответ: Интегрирование $|\psi|^2$ по всему объему $V_П$ нахождения микрочастицы – вероятность достоверного события

$$\int\limits_{V_П} |\psi|^2 d\upsilon = 1. \qquad (13)$$

Соотношение (13) – условие нормировки. Функция ψ, удовлетворяющая (13), называется нормированной.

11*. Принцип суперпозиции состояний.

Ответ: Если квантовая система может находиться в состоянии, описываемом волновой функцией ψ_1, и в состоянии $-\ \psi_2$, то она может находиться и в состоянии

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2, \qquad (14)$$

где c_1, c_2 – произвольные комплексные числа.

12. Прямая и обратная задачи квантовой механики.

Ответ: В квантовой механике известно два типа задач: 1) прямая – по волновой функции предсказать возможные результаты измерений над микрочастицей; 2) обратная – по результатам эксперимента определить волновую функцию.

13. Определение квантового ансамбля микрочастиц (систем).

Ответ: Для воспроизведения большого числа тождественных экспериментов необходимо представить себе большое число микрочастиц (систем), которые находятся в одинаковых макроскопических условиях. Этот набор микрочастиц (систем) и есть квантовый ансамбль микрочастиц (систем).

14*. Определение состояния микрочастицы (системы).

Ответ: Под состоянием микрочастицы (системы), описываемым волновой функцией, понимают принадлежность микрочастицы (системы) к определенному чистому ансамблю.

15*. Определение чистого ансамбля.

Ответ: Если макроскопические условия полностью определяют состояние микрочастиц, то их состояние можно охарактеризовать одной волновой функцией. Такой ансамбль называется чистым ансамблем.

16*. Определение смешанного ансамбля.

Ответ: Смешанный ансамбль содержит микрочастицы в различных состояниях, характеризуемых волновыми функциями $\psi_1, \psi_2 \dots \psi_n$, с вероятностями $P_1, P_2 \dots P_n$ встретить в смешанном ансамбле соответствующие чистые ансамбли.

17. Соотношение неопределенностей Гейзенберга.

Ответ: В общем случае соотношение неопределенностей В. Гейзенберга включает средние квадратичные отклонения импульса и координаты, а именно:

$$\overline{(\Delta p_x)^2}\;\overline{(\Delta x)^2} \ge \frac{\hbar^2}{4}, \qquad (15)$$

где

$$\overline{(\Delta x)^2} = \overline{(x-\bar{x})^2}, \qquad (16)$$

$$\overline{(\Delta p_x)^2} = \overline{(p_x-\overline{p_x})^2}. \qquad (17)$$

Следовательно, нельзя одновременно измерить координату x и импульс p_x, так как $\overline{(\Delta p_x)^2}$ и $\overline{(\Delta x)^2}$ не могут равняться нулю одновременно. Нарушение импульса локализацией приводит к невозможности применения понятия траектории в классическом смысле к движению микрочастиц в квантовой механике. Подобные соотношения устанавливаются и для других некоммутирующих величин (см. вопрос 27).

18. Определение полного набора измеряемых величин и полного измерения.

Ответ: Набор измеряемых величин, достаточный для определения волновой функции, называется полным набором, а данное измерение – полным измерением.

19*. Каким образом измерение влияет на квантовый ансамбль?

Ответ: Измерение преобразует чистый ансамбль в смешанный. Такое превращение чистого ансамбля в смешанный – спектральное разложение исходного ансамбля в спектр по чистым ансамблям, отбираемым прибором.

20*. Какие операторы используются в квантовой механике?

Ответ: Линейные самосопряженные (эрмитовские) операторы.

21. Определение среднего значения величины L в квантовой механике.

Ответ: Среднее значение $\bar{L}$ величины L, изображаемой оператором $\hat{L}$, определяется согласно

$$\overline{L} = \int \psi^*(x) \hat{L} \psi(x) dx. \qquad (18)$$

Имеется в виду чистый ансамбль, описываемый волновой функцией ψ, где dx – элемент объема. Интеграл взят по всей области изменения переменной. Пользуясь свойством самосопряженности оператора $\hat{L}$, среднее значение можно также вычислять с помощью соотношения

$$\overline{L} = \int \psi(x) \hat{L}^* \psi^*(x) dx. \qquad (19)$$

22. Уравнение на собственные значения и собственные функции оператора физической величины L. Основные требования при постановке краевых условий для данного уравнения.

Ответ: Таким уравнением для оператора $\hat{L}$ является

$$\hat{L}\psi_i = L_i \psi_i, \qquad (20)$$

где L_i – собственные значения, ψ_i – собственные функции.

Для задания краевых (граничных) условий для уравнения (20), как правило, применяют требование о сохранении полного числа микрочастиц. Из него естественным образом следуют требования к волновым функциям: 1) конечность; 2) непрерывность; 3) однозначность. Они обычно и приводят к краевым условиям для уравнения (20).

23*. Возможные виды спектров физической величины.

Ответ: Существуют следующие виды спектров: 1) дискретный; 2) состоящий из отдельных полос; 3) непрерывный.

24*. Какие системы функций называются ортонормированными (ортогональными и нормированными)?

Ответ: Системы функций, удовлетворяющие соотношению (для дискретного спектра)

$$\int \psi_m^* \psi_n dx = \delta_{mn}, \qquad (21)$$

где

$$\hat{P}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x},\ \hat{P}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y},\ \hat{P}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}, \qquad (27)$$

то справедливы следующие перестановочные соотношения В. Гейзенберга:

$$x\hat{P}_x - \hat{P}_x x = i\hbar,\ y\hat{P}_y - \hat{P}_y y = i\hbar,\ z\hat{P}_z - \hat{P}_z z = i\hbar. \qquad (28)$$

29. Уравнение для определения собственных значений и собственных функций оператора $\hat{M}^2$ и его решение.

Ответ: Момент импульса изображается оператором

$$\hat{M} = \left[\vec{r}\hat{P}\right], \qquad (29)$$

где $[\ ]$ – векторное произведение, $\hat{P}$ задается согласно (26). Уравнение на собственные значения и собственные функции оператора $\hat{M}^2$ записывается следующим образом:

$$\hat{M}^2\psi = M^2\psi. \qquad (30)$$

Его решение имеет вид

$$M_l^2 = \hbar^2 l(l+1), \quad l = 0,1,..., \qquad (31)$$

$$\psi_{lm} = Y_{lm}(\theta,\varphi), \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, ..., \pm l, \qquad (32)$$

где Y_{lm} – сферические функции. Видно, что M_l^2 в (31) принадлежит $(2l+1)$ собственных функций, отличающихся m, а следовательно, имеет место вырождение. Согласно (31) возможные значения абсолютной величины момента импульса – квантованны.

30. Уравнение для определения собственных значений и собственных функций оператора проекции момента импульса $\hat{M}_z$ и его решение.

Ответ: Для собственных функций и значений $\hat{M}_z$ справедливо уравнение

$$\hat{M}_z\psi = M_z\psi. \qquad (33)$$

Решением его являются функции ψ_{lm} (см.(32)), а

$$M_z = \hbar m, \quad m = 0, \pm 1, ..., \pm l. \qquad (34)$$

Согласно (34) возможные значения проекций момента импульса имеют квантованные значения.

31*. Оператор функции Гамильтона (гамильтониан).

Ответ: В квантовой механике полная энергия не равна сумме кинетической и потенциальной энергий, так как первая зависит от импульсов, а вторая – от координат, которые одновременно не могут быть измерены (см. вопрос 17). Поэтому полная энергия измеряется как целое. $\hat{H}$ – оператор функции Гамильтона (гамильтониан). Выделяют случаи: силы не зависят от скорости микрочастицы и зависят от ее скорости. В общем (последнем) случае

$$\hat{H} = \hat{T} + U(x,y,z,t), \tag{35}$$

где $\hat{T}$ – оператор кинетической энергии, а U – силовая функция. В случае независимости силовой функции от времени она равна потенциальной энергии. В общем случае гамильтониан, характеризующий движение микрочастицы, записывается в виде

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu}(\hat{P} - \frac{e}{c}\vec{A})^2 + eV + U_c, \tag{36}$$

где V и $\vec{A}$ – скалярный и векторный потенциалы электромагнитного поля, а U_c описывает силы, кроме электромагнитных. Гамильтониан определяется следующими факторами: природой микрочастицы и действующими на нее полями. Оператор $\hat{H}$ – основной в квантовой механике, так как после его задания формулируются все особенности исследуемой системы.

32. Нестационарное уравнение Э. Шредингера.

Ответ: Это уравнение для волновой функции ψ имеет вид

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi \tag{37}$$

и является одним из основных в квантовой механике.

33. Закон сохранения числа частиц.

Ответ[1]: Закон записывается в виде уравнения

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \nabla\vec{J} = 0, \tag{38}$$

---

[1] При наличии магнитного поля закон сохранения, описываемый уравнением непрерывности, остается в силе. Меняется только соотношение для плотности тока.

где
$$\vec{J} = \frac{i\hbar}{2\mu}(\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi). \quad (39)$$

Здесь $w = \psi\psi^*$ – плотность вероятности, $\vec{J}$ – вектор плотности тока вероятности.

34. Закон сохранения массы.

Ответ[1]: Данный закон имеет вид

$$\frac{\partial\rho_\mu}{\partial t} + \nabla\vec{J}_\mu = 0, \quad (40)$$

где

$$\vec{J}_\mu = \frac{i\hbar}{2}(\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi), \quad (41)$$

а средняя плотность вещества $\rho_\mu = \mu|\psi|^2$; $\vec{J}_\mu$ – средняя плотность тока вещества.

35. Закон сохранения заряда.

Ответ[1]: Данный закон выражается с помощью

$$\frac{\partial\rho_e}{\partial t} + \nabla\vec{J}_e = 0, \quad (42)$$

где

$$\vec{J}_e = \frac{ie\hbar}{2\mu}(\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi), \quad (43)$$

а средняя плотность заряда $\rho_e = e|\psi|^2$, $\vec{J}_e$ – средняя плотность тока заряда.

36. Уравнение Шредингера для стационарных состояний.

Ответ: Оно имеет вид

$$\hat{H}\psi = E\psi. \quad (44)$$

37. Выражения для коммутатора и квантовой скобки Пуассона.

Ответ: Соотношение для коммутатора

$$\{\hat{H}, \hat{L}\} = \hat{H}\hat{L} - \hat{L}\hat{H}, \quad (45)$$

а квантовая скобка Пуассона дается формулой

$$\left[\hat{H},\hat{L}\right]=\frac{1}{i\hbar}\left\{\hat{L},\hat{H}\right\}. \qquad (46)$$

38. Квантовые уравнения Гамильтона.

Ответ: Они имеют вид

$$\frac{d\hat{X}}{dt}=\left[\hat{H},\hat{X}\right],\ \frac{d\hat{Y}}{dt}=\left[\hat{H},\hat{Y}\right],\ \frac{d\hat{Z}}{dt}=\left[\hat{H},\hat{Z}\right], \qquad (47)$$

$$\frac{d\hat{P}_x}{dt}=\left[\hat{H},\hat{P}_x\right],\ \frac{d\hat{P}_y}{dt}=\left[\hat{H},\hat{P}_y\right],\ \frac{d\hat{P}_z}{dt}=\left[\hat{H},\hat{P}_z\right]. \qquad (48)$$

39. Теоремы Эренфеста.

Ответ: Теоремами П. Эренфеста являются уравнения

$$\frac{d}{dt}\int\psi^* x\psi dx=\frac{1}{\mu}\int\psi^*\hat{P}_x\psi dx, \qquad (49)$$

$$\frac{d}{dt}\int\psi^*\hat{P}_x\psi dx=-\int\psi^*\frac{\partial U}{\partial x}\psi dx. \qquad (50)$$

40. Квантовое уравнение Ньютона.

Ответ: Задается в виде

$$\mu\frac{d^2\bar{x}}{dt^2}=-\overline{\frac{\partial U}{\partial x}}=\bar{F}_x \qquad (51)$$

и следует из теорем Эренфеста.

41. Определение интеграла движения.

Ответ: Величина L называется интегралом движения, если справедливо соотношение

$$\frac{d\hat{L}}{dt}=0, \qquad (52)$$

где $\hat{L}$ – оператор, изображающий L.

42*. Закон сохранения энергии в квантовой механике.

Ответ: Данный закон имеет вид

$$\frac{d\hat{H}}{dt}=0. \qquad (53)$$

43[*]. Что называется волновым пакетом?

Ответ: Если ψ заметно отличается от нуля в очень малой области пространства Δx, то состояние, характеризуемое ψ, называется волновым пакетом.

44. Когда можно считать, что движение микрочастицы происходит по законам классической механики?

Ответ: Когда удовлетворяются условия

$$\overline{p}^2 \gg \frac{\hbar^2}{4(\Delta x)^2}; \qquad (54)$$

$$\left|\frac{\partial U(\overline{x})}{\partial \overline{x}}\right| \gg \frac{1}{2}\left|\frac{\partial^3 U(\overline{x})}{\partial \overline{x}^3}\right| \overline{(\Delta x)^2}, \qquad (55)$$

а $\overline{(\Delta x)^2}$ задается (16). Следовательно, замена квантовых уравнений движения на классические возможна при переходе к большим кинетическим энергиям микрочастиц (см.(54)) и не сильно меняющимся силовым полям (см. (55)).

45. Какие системы называются квазиклассическими?

Ответ: Если длина волны де Бройля микрочастицы мала по сравнению с характеристическим размером $L_{хар}$ системы, то такая система называется квазиклассической.

46. Какой метод эффективен для анализа квазиклассических систем?

Ответ: Метод Вентцеля – Крамерса – Бриллюэна (ВКБ-метод).

47. Условие применимости квазиклассического приближения.

Ответ: Условие квазиклассичности имеет вид

$$\left|\frac{d\lambda}{dx}\right| = \left|\frac{d}{dx}\left(\frac{2\pi\hbar}{p}\right)\right| \ll 2\pi. \qquad (56)$$

Из (56) следует, что квазиклассическое приближение не должно применяться при очень малом импульсе p микрочастицы, в частности, вблизи точек поворота, когда в соответствии с классической механикой микрочастица остановилась бы и начала двигаться в обратном направлении.

48. Первый постулат квантовой механики.

Ответ: Принцип суперпозиции состояний (см. вопрос 11).

49. Второй постулат квантовой механики.

Ответ: Каждой механической величине L в квантовой механике ставится в соответствие линейный самосопряженный оператор $\hat{L}$. При этом между операторами аналогичные соотношения, как и между соответствующими классическими величинами.

50. Третий постулат квантовой механики.

Ответ: Среднее значение любой физической величины L в состоянии, описываемом волновой функцией ψ и оператором $\hat{L}$, определяется соотношением

$$\overline{L} = \int \psi^* \hat{L} \psi d\upsilon = \int \psi \hat{L}^* \psi^* d\upsilon . \tag{57}$$

51. Четвертый постулат квантовой механики.

Ответ: Динамическая переменная (физическая величина) может иметь только такие значения, которые содержатся в спектре собственных значений ее оператора.

52. Пятый постулат квантовой механики.

Ответ: Значение волновой функции в момент времени $t + dt$ определяется через значение волновой функции в момент времени t уравнением Шредингера (37).

Это уравнение отражает принцип причинности в квантовой механике.

53. Преобразование волновой функции от «р»-представления к «х»-представленню.

Ответ: Оно имеет вид

$$\psi(x,t) = \int C(p,t) \psi_p(x) dp , \tag{58}$$

где $\psi_p(x)$ – собственные функции оператора импульса. $\psi(x,t)$, $C(p,t)$ – волновые функции в «х»- и «р»-представлении.

54. Преобразование волновой функции от «x»-представления к «p»-представлению.

Ответ: Выражается согласно

$$C(p,t) = \int \psi(x,t)\psi_p^*(x)dx. \qquad (59)$$

55. Преобразование волновой функции от «x»-представления к «E»-представлению, когда энергия имеет дискретный спектр значений.

Ответ: Дается соотношением

$$C_n(t) = \int \psi(x,t)\psi_n^*(x)dx, \qquad (60)$$

где $\psi_n(x)$ – собственные функции оператора энергии; совокупность $C_n(t)$ – волновая функция в «E»-представлении.

56. Оператор физической величины L в «E»-представлении, когда энергия имеет дискретный спектр значений.

Ответ: Пусть $\hat{L}$ – оператор физической величины L в «x»-представлении, а $\psi_n(x)$ – собственные функции оператора энергии, тогда совокупность всех L_{mn}, вычисляемых согласно

$$L_{mn} = \int \psi_m^*(x)\hat{L}\psi_n(x)dx, \qquad (61)$$

является оператором $\hat{L}$ в «E»-представлении и может быть задана в виде матрицы

$$L = \begin{vmatrix} L_{11} & L_{12} & \dots & L_{1n} & \dots \\ L_{21} & L_{22} & \dots & L_{2n} & \dots \\ & . & . & . & \\ L_{m1} & L_{m2} & \dots & L_{mn} & \dots \\ & . & . & . & \end{vmatrix}, \qquad (62)$$

где L_{mn} – матричные элементы. Представление операторов в виде матриц называется представлением операторов в матричной форме.

57. Какое представление называется шредингеровским?

Ответ: Когда вся информация о зависимости квантовой системы от времени описывается волновой функцией $\psi(x,t)$, являющейся решением уравнения

Шредингера (37), то такой способ описания – шредингеровское представление операторов $\hat{L}$ и волновых функций $\psi(x,t)$. При этом $\hat{L}$ не зависит от времени.

58*. Какое представление называется гейзенберговским?

Ответ: Когда временная зависимость переносится на операторы с помощью

$$\hat{L}(t) = \hat{S}^{-1}(t,0)\hat{L}\hat{S}(t,0), \tag{63}$$

то волновые функции $\Phi(x)$ не зависят от времени, а соответствующее представление операторов и волновых функций называется гейзенберговским представлением. В соотношении (63) $\hat{S}$ – унитарный оператор.

59. Какое представление называется дираковским или представлением взаимодействия?

Ответ: Если

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}(x,t), \tag{64}$$

$$\hat{H}_0\psi_n = E_n\psi_n, \tag{65}$$

где $\hat{W}(x,t)$ – оператор малого возмущения, то решение уравнения Шредингера (37) можно искать в виде

$$\psi(x,t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}\Phi(x,t). \tag{66}$$

Подставив (64) и (66) в (37), а также учтя (65), получаем

$$i\hbar\frac{\partial\Phi(x,t)}{\partial t} = \hat{V}(x,t)\Phi(x,t), \tag{67}$$

$$\hat{V}(x,t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}\hat{W}(x,t)e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}, \tag{68}$$

где $\hat{V}(x,t)$ – оператор энергии возмущения, $\Phi(x,t)$ – волновая функция в представлении взаимодействия (П. Дирака). Следовательно, в этом случае операторы и волновые функции зависят от времени явно.

60. Определение матрицы плотности.

Ответ: Если смешанный ансамбль описывается набором ψ_α и P_α (см. вопрос 16), то среднее значение вычисляется согласно соотношению

$$\bar{L} = \sum_\alpha P_\alpha \bar{L}_\alpha = \sum_\alpha P_\alpha \iint dx dx' \psi_\alpha^*(x') L_{x'x} \psi_\alpha(x), \tag{69}$$

причем $\sum_\alpha P_\alpha = 1$. Эквивалентной формой записи (69) является

$$\bar{L} = \iint dx' dx \rho_{xx'} L_{x'x}, \tag{70}$$

где

$$\rho_{xx'} = \sum_\alpha P_\alpha \psi_\alpha^*(x') \psi_\alpha(x). \tag{71}$$

Элементы $\rho_{xx'}$ формируют матрицу плотности ρ.

Для дискретного спектра аналог (70) имеет вид

$$\bar{L} = \sum_m \sum_n \rho_{nm} L_{mn}, \tag{72}$$

где

$$\rho_{nm} = \sum_\alpha P_\alpha C_{\alpha m}^* C_{\alpha n}, \tag{73}$$

а $C_{\alpha m}$ – амплитуды разложения ψ_α по собственным функциям $\hat{M}$.

61. Уравнение Лиувилля – фон Неймана для статистического оператора.

Ответ: Статистический оператор $\hat{\rho}$ (матрица плотности ρ) может быть найден из решения уравнения Лиувилля – фон Неймана:

$$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = -\left[\hat{H}, \hat{\rho}\right], \tag{74}$$

где $\left[\hat{H}, \hat{\rho}\right]$ – квантовая скобка Пуассона. Оператор $\hat{\rho}$ позволяет единообразно описывать как смешанные, так и чистые ансамбли. Статистический оператор (матрица плотности) и смешанные ансамбли (смеси) были впервые введены Й. фон Нейманом. С помощью статистического оператора можно рассматривать не только движение микрочастиц, но и макроскопических систем, взаимодействие между ними. Отмеченные свойства важны в практических приложениях, в частности, в электронике при описании транспортных явлений.

62. Что такое гармонический осциллятор?

Ответ: Гармонический осциллятор – система, описываемая гамильтонианом

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}_x^2}{2\mu} + \frac{\mu\omega_0^2}{2}\hat{X}^2, \qquad (75)$$

где ω_0 – собственная (циклическая) частота осциллятора.

63. Выражение для уровней энергии гармонического осциллятора. Нулевая энергия осциллятора.

Ответ: Энергия гармонического осциллятора имеет дискретные значения

$$E_n = \hbar\omega_0\left(n + \frac{1}{2}\right),\ n = 0, 1, 2, \ldots, \qquad (76)$$

где n – главное квантовое число. Наименьшая (нулевая) энергия гармонического осциллятора равна

$$E_0 = \frac{\hbar\omega_0}{2}. \qquad (77)$$

Нулевая энергия – следствие справедливости соотношения неопределенностей.

64. Вид спектра энергии в случае отталкивания микрочастицы.

Ответ: На рис. 1 приведена потенциальная энергия $U(r)$ для этого случая. Для него полная энергия положительна и спектр энергии непрерывен, т. е. $E \in [0,+\infty)$.

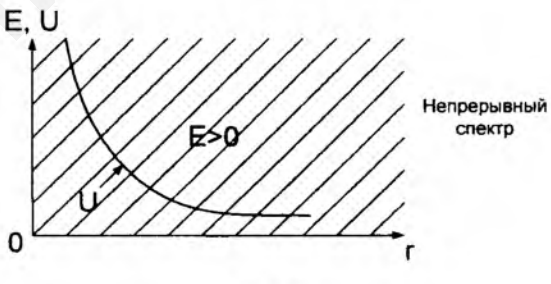

Рис. 1

65. Вид спектра энергии в случае притяжения микрочастицы.

Ответ: На рис. 2 показана потенциальная энергия $U(r)$ для этого случая. Выделим две ситуации: 1) $E > 0$; 2) $E < 0$. В первой ситуации спектр непрерывный, во второй – дискретный. Сплошной спектр (ситуация 1) соответствует ионизированному атому, энергия ионизации атома $I = -E_1$, где E_1 – энергия электрона в нормальном (невозбужденном) состоянии. Вторая ситуация характерна для электрона в атоме.

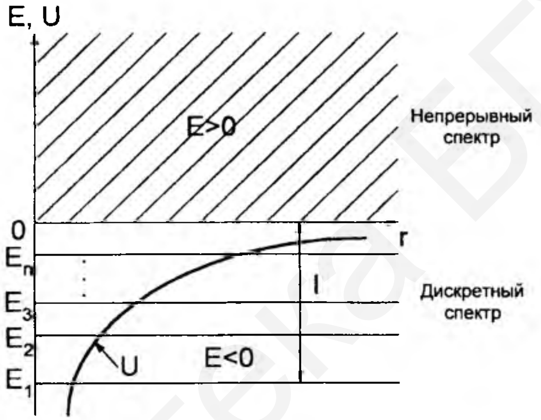

Рис. 2

66. Вид спектра энергии в случае двухатомной молекулы.

Ответ: Потенциальная энергия $U(r)$, характерная для двухатомных молекул АВ, показана на рис. 3. При больших r атомы А и В не взаимодействуют ($U \to 0$ при $r \to \infty$). При меньших r атомы притягиваются. При еще меньших r атомы отталкиваются вследствие отталкивания ядер и электронных оболочек при проникновении одного атома в другой. Если $E > 0$, то спектр непрерывен. Если $E < 0$, то спектр дискретный. В этом случае атомы образуют молекулу АВ. Работа по диссоциации молекулы $D = -E_1$.

67*. Выражение для уровней энергии атома водорода и водородоподобных ионов.

Ответ: Оно имеет вид

$$E_n = -\frac{Z^2 e^4 \mu}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}, \tag{78}$$

где главное квантовое число $n = 1, 2, \ldots$, а Z – номер ядра в системе Менделеева, e – элементарный заряд.

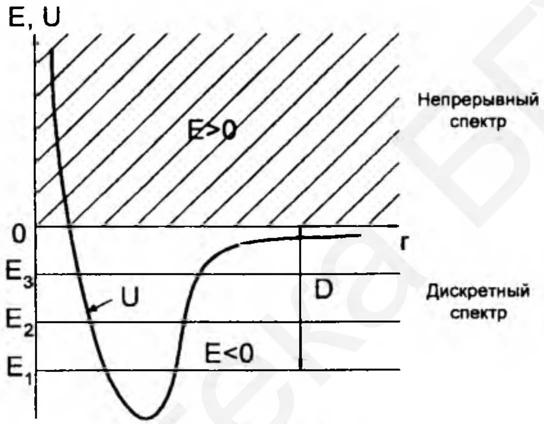

Рис. 3

68. Спектральная серия Лаймана.

Ответ: Переходы на уровень $n = 1$ образуют спектральную серию Лаймана водорода

$$\nu = R(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2}),\ n = 2, 3, \ldots , \tag{79}$$

где ν – частота, R – постоянная Ридберга – Ритца, равная $3{,}27 \cdot 10^{15} c^{-1}$.

69. Спектральная серия Бальмера.

Ответ: Переходы на уровень $n = 2$ образуют спектральную серию Бальмера водорода

$$\nu = R(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}),\ n = 3, 4, \ldots . \tag{80}$$

70. Что такое спин электрона?

Ответ: Кроме орбитальных механического и магнитного моментов, создаваемых в результате движения центра тяжести электрона, он характеризуется собственными механическим и магнитным моментами вследствие его вращения подобно волчку. Собственный механический и магнитный моменты – спиновые моменты. Явление же называется спином электрона.

71. Соотношение для проекции собственного (спинового) механического момента электрона.

Ответ: Проекция собственного механического момента электрона на направление 0z равна

$$s_z = \pm\frac{\hbar}{2}. \qquad (81)$$

72. Соотношение для проекции собственного (спинового) магнитного момента электрона.

Ответ: Проекция собственного магнитного момента на направление 0z равна

$$M_z = \pm\frac{e\hbar}{2\mu c}. \qquad (82)$$

73*. Уравнение Паули.

Ответ: Уравнение В. Паули имеет вид

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \frac{1}{2\mu}(\hat{P} + \frac{e}{c}\vec{A})^2\Psi - eV\Psi + U\Psi + \frac{e\hbar}{2\mu c}(\vec{\sigma}\vec{H})\Psi, \qquad (83)$$

где

$$\Psi = \begin{vmatrix} \psi_1 & 0 \\ \psi_2 & 0 \end{vmatrix}, \qquad (84)$$

а $\psi_1 = \psi(x, y, z, +\hbar/2, t)$, $\psi_2 = \psi(x, y, z, -\hbar/2, t)$, $\vec{s} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$, $\vec{s}$ – собственный механический момент, $\vec{\sigma}$ – вектор-оператор с компонентами спиновых матриц. Остальные обозначения в (83) соответствуют принятому в гамильтониане (36). При этом в (83) учтен знак заряда электрона. Вследствие

(84) уравнение Паули, учитывающее спин электрона, – это фактически два уравнения Шредингера.

74. Сущность простого эффекта Зеемана.

Ответ: Расщепление спектральных линий в сильном магнитном поле – простой эффект Зеемана.

75. Правила квантования полного момента импульса и его проекции.

Ответ: Оператор полного момента импульса $\hat{J}$ равен сумме операторов орбитального $\hat{M}$ и спинового $\hat{s}$ моментов, а именно:

$$\hat{J} = \hat{M} + \hat{s}. \tag{85}$$

Подобно орбитальному моменту (см. (31) и (34)) правила квантования полного момента импульса и его проекции записываются в виде

$$J^2 = \hbar^2 j(j+1), \; j = 1/2, 3/2, \ldots, \tag{86}$$

$$J_z = \hbar m_j, \; m_j = \pm 1/2, \pm 3/2, \ldots, \pm j, \tag{87}$$

где

$$j = l + l_s \text{ или } j = |l - l_s|, \tag{88}$$

а l – орбитальное число, l_s – спиновое число.

76. Предмет теории возмущения.

Ответ: Предположим, что задача может быть приближенно сведена к более простой с гамильтонианом $\hat{H}^0$. Это допустимо, когда оператор $\hat{H}$ решаемой задачи мало отличается от $\hat{H}^0$, для которого собственные значения E_n^0 и функции ψ_n^0 известны. Пусть отличие определяется внешним полем. Тогда действие этого поля можно интерпретировать в качестве возмущения. Методы решения такого типа задач – предмет теории возмущения.

77. Сущность эффекта Штарка.

Ответ: Расщепление спектральных линий атомов в электрическом поле – эффект Штарка.

78. К каким последствиям может приводить возмущение для системы, которая в невозмущенном состоянии имела непрерывный спектр?

Ответ: Возможны две ситуации: 1) непрерывность спектра не нарушается; 2) возникает спектр, состоящий из разрешенных и запрещенных зон.

79. Какое рассеяние называется упругим, а какое – неупругим?

Ответ: Пусть на микрочастицу падает поток электронов. При этом они могут: 1) изменить направление движения; 2) часть своей энергии ε отдать микрочастице. При упругом рассеянии $\varepsilon = 0$, а неупругом $\varepsilon \neq 0$.

80. Дифференциальное и полное эффективные сечения микрочастицы.

Ответ: Пусть поток электронов, рассеянных на микрочастице, через площадку ds, с энергией $E-\varepsilon$ равен dN_{ε}. Число dN_{ε} пропорционально числу микрочастиц N на $1\,см^2$ в $1\,с$ в первичном потоке и телесному углу $d\Omega$:

$$dN_{\varepsilon} = N\sigma(\varepsilon,\theta,\varphi)d\Omega, \tag{89}$$

где θ, φ – сферические координаты. Вероятность рассеяния в угол $d\Omega$ с уменьшением энергии ε выражается с помощью

$$\frac{dN_{\varepsilon}}{N} = \sigma(\varepsilon,\theta,\varphi)d\Omega, \tag{90}$$

где $\sigma(\varepsilon,\theta,\varphi)$ – дифференциальное эффективное сечение микрочастицы для неупругого рассеяния в угол $d\Omega$ с потерей энергии ε. Полное эффективное сечение микрочастицы вычисляется согласно

$$\sigma_{\varepsilon} = \int \frac{dN_{\varepsilon}}{N}. \tag{91}$$

Если ε изменяется непрерывно, то (90) заменяется на

$$\frac{dN_{\varepsilon}}{N} = \sigma(\varepsilon,\theta,\varphi)d\varepsilon d\Omega, \tag{92}$$

где смысл дифференциального сечения имеет $\sigma d\varepsilon$.

Эффективное сечение может зависеть и от других величин, например спина.

81. Основная задача теории столкновений.

Ответ: Расчет дифференциального эффективного сечения микрочастицы.

82. Формула Резерфорда.

Ответ: Упругое рассеяние достаточно быстрых микрочастиц описывается формулой Э. Резерфорда для дифференциального эффективного сечения

$$\sigma(\theta) = \frac{e_1^2 e^2 Z^2}{4\mu^2 \upsilon^4} cosec^4\left(\frac{\theta}{2}\right), \tag{93}$$

где Z – атомный номер рассеивающей микрочастицы, μ и e_1 – масса и заряд рассеянных микрочастиц, υ – их скорость.

83. Формула Резерфорда в случае рассеяния микрочастицы в кулоновском поле и условие ее применимости.

Ответ: Она принимает вид

$$\sigma(\theta) = \frac{e^2 Z_1^2 Z_2^2}{4\mu^2 \upsilon^4} cosec^4\left(\frac{\theta}{2}\right), \tag{94}$$

где eZ_1 и eZ_2 – заряды микрочастиц. Формула применима, когда

$$\hbar\upsilon >> e^2 Z_1 Z_2 . \tag{95}$$

84. Основная задача теории квантовых переходов.

Ответ: Вычисление вероятности перехода с одного квантового уровня на другой.

85*. Какой характер носит переход с одного квантового уровня E_n на другой E_m?

Ответ: Он носит резонансный характер, т.е. в спектре возмущения должна содержаться частота

$$\omega_{mn} = (E_m - E_n)/\hbar . \tag{96}$$

86*. Правила отбора.

Ответ: С участием света возможны переходы, в которых орбитальное l и магнитное m квантовые числа изменяются согласно правилам отбора

$$l' - l = \pm 1,$$
$$m' - m = \pm 1{,}0. \qquad (97)$$

Они подтверждены спектроскопическими исследованиями. Согласно (97) оптические переходы происходят только между s- и p-, p- и d-, d- и f-термами.

87. Основная задача теории дисперсии.

Ответ: Расчет характеристик рассеяния света.

88. Какие компоненты называются «фиолетовыми» и «красными» рассеянного комбинационного излучения?

Ответ: Пусть с атомом в состоянии с энергией E_n «сталкивается» квант света $\varepsilon = \hbar\omega$, часть энергии которого идет на возбуждение атома на уровень $E_m > E_n$ (рис. 4). В результате рассеянный квант имеет энергию

$$\hbar\omega'' = \hbar\omega - (E_m - E_n). \qquad (98)$$

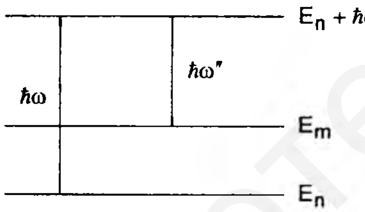

Рис. 4

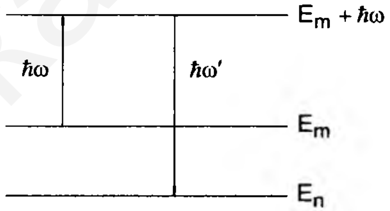

Рис. 5

Если атом в состоянии $E_m > E_n$, то рассеянный квант света может приобрести энергию от атома (рис. 5):

$$\hbar\omega' = \hbar\omega + (E_m - E_n). \qquad (99)$$

Частоты $\omega' > \omega$ – «фиолетовые» компоненты, а частоты $\omega'' < \omega$ – «красные» компоненты рассеянного комбинационного излучения. Экспериментально явление было установлено Г. Ландсбергом и Л. Мандельштамом для твердых тел.

89. Основная задача теории фотоэлектрического эффекта на атомах.

Ответ: Расчет вероятности ионизации атома под действием световой волны и нахождение распределения вылетающих электронов.

90. Основные выводы теории фотоэлектрического эффекта на атомах.

Ответ: Расчет вероятности перехода приводит к выводам: 1) число вылетающих электронов пропорционально интенсивности падающего света; 2) скорость электронов υ зависит от частоты ω падающего света согласно уравнению А. Эйнштейна:

$$\frac{\mu\upsilon^2}{2} = \hbar\omega - \xi, \tag{100}$$

где ξ – работа выхода; 3) максимальное число электронов вылетает в направлении электрического вектора световой волны.

91*. Что называется туннельным эффектом?

Ответ: Прохождение микрочастицы через (сквозь) барьер (при $E < U_m$, где U_m – высота потенциального барьера, а E – энергия микрочастицы) называется туннельным эффектом.

92*. Может ли быть обобщена квантовомеханическая теория движения одной микрочастицы на систему N микрочастиц?

Ответ: Да, с этой целью можно рассмотреть систему из N микрочастиц как одну микрочастицу с $3N$ степенями свободы, а с учетом спина – $4N$.

93*. Уравнение Шредингера для системы микрочастиц.

Ответ: Если рассматривается система N микрочастиц с координатами x_k, y_k, z_k ($k = \overrightarrow{1, N}$) с массами μ_k, то волновая функция задается в виде

$$\psi = \psi(x_1, y_1, z_1, \ldots, x_N, y_N, z_N, t). \tag{101}$$

Она находится из уравнения Шредингера:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi, \tag{102}$$

где $\hat{H}$ – гамильтониан системы вида

$$\hat{H} = \sum_{k=1}^{N}\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu_k}\nabla_k^2 + U_k(x_k, y_k, z_k, t)\right] + \sum_{k \neq j=1}^{N} U_{kj}(x_k, y_k, z_k, x_j, y_j, z_j), \quad (103)$$

где U_k – силовая функция k-й микрочастицы во внешней поле; U_{kj} – энергия взаимодействия k-й и j-й микрочастиц.

94. Гамильтониан системы одинаковых микрочастиц.

Ответ: Рассмотрим систему N одинаковых микрочастиц (масса μ, заряд e, спин s и т.д.), которые в условиях (внешнее поле, другие микрочастицы) ведут себя одинаковым образом. Координаты k-й микрочастицы – $q_k(x_k, y_k, z_k)$, а также, возможно, s_k. Гамильтониан системы имеет вид

$$\hat{H}(q_1,...,q_N,t) = \sum_{k=1}^{N}\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_k^2 + U(q_k,t)\right] + \sum_{k>j=1}^{N} W(q_k, q_j), \quad (104)$$

где $U(q_k,t)$ – энергия k-й микрочастицы во внешнем поле; $W(q_k,q_j)$ – энергия взаимодействия k-й и j-й микрочастиц. Тождественность микрочастиц отражена в одинаковости μ, U, W во всех членах гамильтониана.

95. Принцип тождественности микрочастиц (шестой постулат квантовой механики).

Ответ: В системе одинаковых микрочастиц реализуются состояния, которые не изменяются при обмене одинаковых микрочастиц.

96*. Какие состояния в квантовой механике называются симметричными и антисимметричными?

Ответ: Когда

$$\hat{P}_{kj}\Psi_s = +\Psi_s \text{ для всех } kj, \quad (105)$$

$$\hat{P}_{kj}\Psi_a = -\Psi_a \text{ для всех } kj, \quad (106)$$

где $\hat{P}_{kj}$ – оператор перестановки, то функции Ψ_s называются симметричными, а функции Ψ_a – антисимметричными. Заметим, что не может быть функций, которые в части микрочастиц симметричны, а в иной –

антисимметричны. При этом если система обнаружена в состоянии того или иного класса (Ψ_s или Ψ_a), то она никогда не перейдет в другой класс.

97. Какие микрочастицы называются микрочастицами Бозе?

Ответ: Если спин $s = \hbar m$, $m = 0, 1, \dots$ микрочастиц, описываемых симметричными функциями, то их называют микрочастицами Ш. Бозе (бозонами), а совокупность таких микрочастиц – ансамблем Бозе – Эйнштейна.

98. Какие микрочастицы называются микрочастицами Ферми?

Ответ: Если спин $s = \hbar m$, $m = 1/2, 3/2, \dots$ микрочастиц, описываемых антисимметричными функциями Ψ_a, то их называют микрочастицами Э. Ферми (фермионами), а совокупность – ансамблем Ферми – Дирака.

99. Какие микрочастицы являются фермионами со спином 1/2?

Ответ: К простейшим микрочастицам Ферми со спином 1/2 относятся: электроны, протоны, нейтроны, гипероны, μ-мезоны, нейтрино и их античастицы.

100. Какие микрочастицы являются бозонами со спином 0 и 1?

Ответ: К простейшим микрочастицам Бозе относятся: π-мезоны, K-мезоны (их спин равен нулю) и фотон (спин равен единице).

101. Каким образом определяется принадлежность сложной системы к тому или иному классу микрочастиц?

Ответ: Она определяется числом и классом более простых микрочастиц, входящих в микрочастицу.

102*. Принцип Паули.

Ответ: В состоянии, определяемом полным набором четырех квантовых чисел, не может быть более одного фермиона.

103. Сущность метода вторичного квантования.

Ответ: Ансамбли одинаковых микрочастиц эффективно анализируются методом вторичного квантования. В нем в качестве независимых переменных вместо полного набора четырех механических величин для описания состояния отдельных микрочастиц используют числа микрочастиц в этих состояниях.

104. Распределение Ферми – Дирака.

Ответ: Для среднего числа микрочастиц в состоянии с энергией ε_m распределение Ферми – Дирака задается в виде

$$\overline{N}_m = \overline{N(\varepsilon_m)} = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon_m}{\beta} - \alpha} + 1}, \tag{107}$$

где ε_m – собственное значение энергии частиц, β, α – постоянные. Причем $\beta = k_Б T$. Постоянная α определяется согласно закону сохранения числа микрочастиц. Статистика Ферми – Дирака справедлива для микрочастиц Ферми, которые подчиняются принципу Паули и характеризуются антисимметричными волновыми функциями Ψ_a.

105. Распределение Бозе – Эйнштейна.

Ответ: Для среднего числа микрочастиц в состоянии с энергией ε_m распределение Бозе – Эйнштейна задается в виде

$$\overline{N}_m = \overline{N(\varepsilon_m)} = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon_m}{\beta} - \alpha} - 1}. \tag{108}$$

Статистика Бозе – Эйнштейна справедлива для микрочастиц Бозе, характеризуемых симметричными функциями Ψ_s.

106. Из каких частей состоит энергия, обусловленная взаимодействием электронов?

Ответ: Она состоит из взаимной кулоновской и обменной энергий. Обменная энергия возникает при любом взаимодействии одинаковых микрочастиц в квантовой механике и не имеет аналогов в классической физике.

107. С помощью какой теории может быть объяснена периодическая система элементов Менделеева?

Ответ: С помощью квантовой механики.

108. Исходный гамильтониан, используемый при построении зонной теории твердых тел.

Ответ: Кристалл является единой системой легких (электроны) и тяжелых (ядра) микрочастиц и описывается волновой функцией

$$\psi = \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots, \vec{r}_i, \ldots; \vec{R}_1, \vec{R}_2, \ldots, \vec{R}_\alpha, \ldots), \tag{109}$$

где $\vec{r}_i$, $\vec{R}_\alpha$ – координаты электронов и ядер. Когда релятивистские эффекты и спины электронов и ядер не играют существенной роли, то гамильтониан задается соотношением

$$\begin{aligned} \hat{H} = &-\sum_\alpha \frac{\hbar^2 \nabla_\alpha^2}{2M_\alpha} - \sum_i \frac{\hbar^2 \nabla_i^2}{2m_0} + \frac{1}{2} \sum_{i, j \neq i} \frac{e^2}{\left|\vec{r}_i - \vec{r}_j\right|} + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta \neq \alpha} \frac{Z_\alpha Z_\beta e^2}{\left|\vec{R}_\alpha - \vec{R}_\beta\right|} - \frac{1}{2} \sum_{i, \alpha} \frac{Z_\alpha e^2}{\left|\vec{R}_\alpha - \vec{r}_i\right|} + \hat{V}, \end{aligned} \tag{110}$$

где m_0, M_α – массы электрона и α-го ядра; eZ_α – заряд α-го ядра. Первые два члена – кинетические энергии ядер и электронов; третий, четвертый и пятый члены – энергия попарного кулоновского взаимодействия электронов, ядер и электронов с ядрами (1/2 входит из-за двойного учета одной и той же энергии в суммах); $\hat{V}$ – энергия всех микрочастиц во внешнем поле (часто полагается $\hat{V} = 0$). Таким образом, уравнение Шредингера содержит $3(Z+1)N$ переменных, если N – число атомов в кристалле. Известно, что в 1 см^3 находится около $5 \cdot 10^{22}$ атомов. Следовательно, для Z = 14 получаем $\sim 2 \cdot 10^{24}$ переменных. Очевидно, что такое уравнение решить невозможно.

109. Основной методологический подход, используемый при построении зонной теории твердых тел.

Ответ: Он заключается в сведении задачи с большим числом взаимодействующих микрочастиц к системе невзаимодействующих микрочастиц.

110. Основные приближения, используемые при построении зонной теории твердых тел.

Ответ: Ими являются адиабатическое приближение Борна – Оппенгеймера и одноэлектронное приближение. В адиабатическом приближении полагается, что ядра покоятся при рассмотрении движения электронов, а на положение ядер влияние оказывает лишь усредненное движение электронов. К сожалению, после его введения задача остается многоэлектронной, так как исключаются только первый и четвертый члены в (110). Эффективным является использование метода Хартри – Фока, позволяющего свести эту многоэлектронную задачу к одноэлектронной. Идея метода заключается в замене потенциальной энергии взаимодействия электронов (третий член в (110)) эффективным внешним электрическим полем, в котором каждый электрон движется независимо. В результате уравнение Шредингера распадается на следующие одноэлектронные уравнения:

$$\left\{-\frac{\hbar^2\nabla_i^2}{2m_0}+U'(\vec{r}_i)+U_{эф}(\vec{r}_i)\right\}\psi_i(\vec{r}_i)=\varepsilon_i\psi_i(\vec{r}_i), \qquad (111)$$

где U' – потенциальная энергия i-го электрона в поле всех ионов, $U_{эф}$ – потенциальная энергия, характеризующая действие эффективного внешнего поля. Следовательно, каждый электрон в кристалле описывается одноэлектронной волновой функцией $\psi_i(\vec{r}_i)$. Зонная теория твердых тел основана на указанных двух базовых приближениях. Если предположить, что атомы идеальной кристаллической решетки зафиксированы, то потенциал атомных остовов меняется в пространстве с периодичностью решетки. В связи с этим логично допустить, что и $U_{эф}$ меняется периодично. Тогда полный потенциал кристалла

$$V(\vec{r})=U'+U_{эф} \qquad (112)$$

обладает периодичностью решетки, а (111) упрощается к виду

$$\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m_0}\psi + [E - V(\bar{r})]\psi = 0, \qquad (113)$$

где $V(\bar{r})$ – потенциал самосогласованного поля. Решение уравнения (113) для исследуемого твердого тела (соответствующего вида $V(\bar{r})$) и приводит к построению его зонной теории.

111. Два рода связей, приводящих к образованию молекул.

Ответ: К образованию молекул приводят связи: 1) ионные (гетерополярные); 2) гомополярные. Когда молекулу можно представить как образованную из положительных и отрицательных ионов, например NaCl, говорят об ионной связи. Если деление на ионы провести невозможно, например H_2, то имеет место гомополярная связь. Ведущая роль в образовании молекулы водорода принадлежит обменным силам.

112. Парамагнетизм и диамагнетизм атомов.

Ответ: Оператор проекции магнитного момента атома вдоль направления магнитного поля состоит из двух частей: первая зависит от магнитного поля, вторая – нет. Когда преобладает первая часть, то это случай парамагнетизма, когда вторая – диамагнетизма.

113. Сущность ферромагнетизма вещества.

Ответ: Ферромагнитные вещества могут оставаться намагниченными и в отсутствии внешнего магнитного поля. Гейзенберг доказал, что силы, ориентирующие элементарные магниты в этих материалах, – обменные силы.

114. Применима ли квантовая механика к описанию атомного ядра?

Ответ: Да, квантовая механика позволяет проанализировать характер ядерных взаимодействий и соответствующие экспериментальные данные.

Дополнительные вопросы

К вопросу 6

115. Группа волн.

Ответ: Это суперпозиция волн, которые мало отличаются по длине волны и направлению распространения.

116. Фазовая и групповая скорости.

Ответ: Рассмотрим одномерный случай. Тогда в (6) величина

$$\alpha = \omega t - kx \tag{114}$$

называется фазой волны, а скорость распространения точки x с определенной фазой α

$$u = \frac{\omega}{k} \tag{115}$$

является фазовой скоростью. В то же время центр группы волн перемещается с групповой скоростью V, которая равна механической скорости микрочастицы υ, с движением которой связана эта группа волн.

К вопросу 9

117. Плотность вероятности.

Ответ: Она определяется из соотношения (см. (11) и (12)):

$$w(x,y,z,t) = \frac{dW}{d\upsilon} = |\psi(x,y,z,t)|^2. \tag{116}$$

К вопросу 11

118. Следствие принципа суперпозиции.

Ответ: Если имеются состояния системы, описываемые волновыми функциями ψ_1, ψ_2, ... ,ψ_n, то в соответствии с принципом суперпозиции она может находиться и в состоянии

$$\psi = \sum_{i=1}^{n} c_i \psi_i, \tag{117}$$

где c_i – произвольные комплексные числа.

Если в суперпозиции состояния отличаются бесконечно мало, то вместо суммы (117) используется интеграл.

К вопросам 14-16

119. Можно ли рассматривать волновую функцию или набор волновых функций (в случае смешанного ансамбля) как объективную характеристику квантовой системы?

Ответ: Да, они не зависят от наблюдателя.

К вопросам 15 и 16

120. Явление, существенным образом различающее чистые и смешанные ансамбли.

Ответ: Если в чистом ансамбле имеется интерференция между частными состояниями, то в смешанном ансамбле она отсутствует.

К вопросам 19 и 43

121. Редукция (сведение) волнового пакета.

Ответ: В общем случае состояние микрочастицы ψ характеризуется волновым пакетом (см. вопрос 43). В результате измерения первоначальное состояние ψ переходит в одно из состояний ψ_i. Такое изменение волновой функции – редукция (сведение) волнового пакета. Это означает, что после измерения микрочастица принадлежит новому чистому ансамблю, описываемому ψ_i.

К вопросу 20

122. Линейный самосопряженный (эрмитовский) оператор.

Ответ: Для линейного оператора $\hat{L}$ справедливо соотношение

$$\hat{L}(c_1 u_1 + c_2 u_2) = c_1 \hat{L} u_1 + c_2 \hat{L} u_2, \tag{118}$$

где u_1, u_2 – функции, c_1, c_2 – постоянные, которые могут быть произвольными. Когда линейный оператор $\hat{L}$ удовлетворяет равенству

$$\int u_1^*(x) \hat{L} u_2(x) dx = \int u_2(x) \hat{L}^* u_1^*(x) dx, \tag{119}$$

то он называется самосопряженным (эрмитовским).

К вопросу 23

123. Что такое «квантование»?

Ответ: Если физическая величина имеет дискретные (квантованные) значения, то говорят, что наблюдается ее «квантование».

К вопросу 24

124. Условие нормировки собственных функций непрерывного спектра.

Ответ: Функции $\psi(x,L)$, где L – собственные значения физической величины, нормируются согласно

$$\int \psi^{*}(x,L')\psi(x,L)dx = \delta(L'-L), \tag{120}$$

где $\delta(L'-L)$ – функция Дирака или δ-функция.

К вопросу 28

125. Оператор координаты микрочастицы.

Ответ: Есть само число x, т.е.

$$\hat{X} = x. \tag{121}$$

Поэтому более строгий вид, например, первого соотношения в (28) следующий:

$$\hat{X}\hat{P}_x - \hat{P}_x\hat{X} = i\hbar. \tag{122}$$

К вопросу 31

126. Оператор кинетической энергии.

Ответ: Выражается согласно формуле

$$\hat{T} = \frac{\hat{P}^2}{2\mu} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2. \tag{123}$$

К вопросу 31, 42

127. Оператор полной энергии.

Ответ: Задается в виде

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{U}(x,y,z), \tag{124}$$

где $\hat{U}$ – оператор потенциальной энергии, равный потенциальной энергии.

Если гамильтониан не зависит явно от времени, то силовая функция в (35) совпадает с потенциальной энергией, а следовательно, он равен оператору полной энергии. Именно для этого случая и записан закон сохранения энергии (53).

К вопросу 31, 92, 93

128. Число степеней свободы системы.

Ответ: Равно числу независимых переменных, входящих в гамильтониан.

К вопросу 58

129. Унитарная матрица.

Ответ: Для унитарной матрицы (унитарного оператора) $\boldsymbol{S}$ справедливы соотношения

$$\boldsymbol{S}^{+}\boldsymbol{S} = \boldsymbol{S}\boldsymbol{S}^{+} = \mathbf{1}, \tag{125}$$

где индекс «+» означает эрмитовское сопряжение. Для элементов матрицы $\boldsymbol{S}^{+}$ справедливо равенство

$$(\boldsymbol{S}^{+})_{nm} = (\boldsymbol{S}^{*})_{mn}. \tag{126}$$

Отметим, что $\boldsymbol{S}$ не является эрмитовским (см. вопрос 122), так как согласно (125)

$$\boldsymbol{S}^{+} = \boldsymbol{S}^{-1}. \tag{127}$$

В то же время для эрмитовской матрицы $\boldsymbol{F}$

$$\boldsymbol{F}^{+} = \boldsymbol{F}. \tag{128}$$

К вопросу 67

130. Спектральный терм.

Ответ: Величина энергии квантового уровня атома, деленная на $\hbar$. Для атома водорода – это $E_n/\hbar$, где E_n задается (78).

К вопросу 67, 86

131. Что такое s-, p-, d-, f-термы и состояния?

Ответ: Когда квантовые числа l и m (см. вопросы 29 и 30) равны 0, то говорят об s-состоянии. Соответствующий терм – s-терм. Для p-состояния и терма $l=1$ ($m=0, \pm 1$). Для d-состояния и терма $l=2$ ($m=0, \pm 1, \pm 2$). Для f-состояния и терма $l=3$ ($m=0, \pm 1, \pm 2, \pm 3$).

К вопросу 73

132. Спиновые матрицы.

Ответ: Спиновые матрицы σ_x, σ_y, σ_z задаются двухрядными матрицами

$$\sigma_x = \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}, \sigma_y = \begin{vmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{vmatrix}, \sigma_z = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix}. \qquad (129)$$

Для операторов проекций спина $\hat{s}_x$, $\hat{s}_y$, $\hat{s}_z$ тогда справедливы соотношения

$$\hat{s}_x = \frac{\hbar}{2}\sigma_x, \hat{s}_y = \frac{\hbar}{2}\sigma_y, \hat{s}_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_z. \qquad (130)$$

К вопросу 85

133. Комбинационный принцип Ритца.

Ответ: Частоты атомов задаются как разности их спектральных термов $E_m/\hbar$ (см. вопрос 130) и образуют матрицу

$$\boldsymbol{\Omega} = \begin{vmatrix} 0 & \omega_{12} & \ldots & \omega_{1n} & \ldots \\ \omega_{21} & 0 & \ldots & \omega_{2n} & \ldots \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ \omega_{m1} & \omega_{m2} & \ldots & \omega_{mn} & \ldots \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \end{vmatrix}, \qquad (131)$$

где ω_{mn}, следовательно, вычисляется согласно (96).

К вопросу 86

134. Орбитальное и магнитное квантовые числа.

Ответ: В атоме водорода главное квантовое число n определяет величину энергии E_n (78), орбитальное число l – величину момента импульса M_l^2 (см. (31)), магнитное число m – величину проекции момента импульса M_z (см. (34)). В общем случае квантовый уровень атома характеризуется тремя квантовыми числами: n, l и m (или j, см. вопрос 75).

К вопросу 91

135. Что такое потенциальный барьер?

Ответ: Две области разделены потенциальным барьером, если потенциальная энергия в них меньше, нежели в области между ними (в барьере).

136. Коэффициент отражения и прохождения (прозрачности) барьера.

Ответ: Коэффициентом отражения R называют отношение потока отраженных от потенциального барьера микрочастиц к потоку падающих на него. Коэффициент прохождения (прозрачности) D – отношение потока прошедших через (сквозь) барьер микрочастиц к потоку падающих на него.

К вопросу 96

137. Оператор перестановки.

Ответ: Под ним подразумевается оператор $\hat{P}_{kj}$, означающий то, что координаты k-й и j-й частиц должны быть переставлены местами.

К вопросу 102

138. Полный набор квантовых чисел.

Ответ: Полностью квантовое состояние задается четырьмя квантовыми числами (полным набором квантовых чисел), характеризующими энергию (n), орбитальный момент (l), проекцию орбитального момента (m), проекцию спина (m_s), например для электрона.

Автор выражает благодарность Н. В. Коломейцевой за набор текста данного учебно-методического пособия.

Литература

1. Блохинцев, Д. И. Основы квантовой механики / Д. И. Блохинцев. – М. : Наука, 1976. – 664 с.
2. Ландау, Л. Д. Квантовая механика. Нерелятивистская теория, т.3 / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. – М. : Наука, 1974. – 752 с.
3. Карякин, Н. И. Краткий справочник по физике / Н. И. Карякин, К. Н. Быстров, П. С. Киреев. – М. : Высш. шк., 1969. – 600 с.
4. Киреев, П. С. Физика полупроводников / П. С. Киреев. – М. : Высш. шк., 1975. – 584 с.
5. Джеммер, М. Эволюция понятий квантовой механики / М. Джеммер. – М. : Наука, 1985. – 384 с.
6. Абрамов, И. И. Статистическая физика и квантовая механика: учебная программа для высших учеб. заведений по спец. 41 01 02 «Микроэлектроника» / Сб. типовых учеб. программ для высших учеб. заведений по спец. 41 01 02 (Т.07.01.00) «Микроэлектроника». Общенаучные и общепрофессиональные дисциплины. – Минск : БГУИР, 2002. – С. 31–38.

Св. план 2007, поз. 96

Учебное издание

Абрамов Игорь Иванович

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА. ВОПРОСЫ И ОТВЕТЫ

Учебно-методическое пособие

по дисциплине
«Квантовая механика и статистическая физика»
для студентов специальностей
I-41 01 03 «Квантовые информационные системы» и
I-41 01 02 «Микро- и наноэлектронные технологии и системы»
всех форм обучения

Редактор Т. П. Андрейченко

Корректор Е. Н. Батурчик

Подписано в печать 14.03.2007. Формат 60x84 1/16. Бумага офсетная.
Гарнитура «Таймс». Печать ризографическая. Усл. печ. л. 2,
Уч.-изд. л. 2,1. Тираж 100 экз. Заказ 103.

Издатель и полиграфическое исполнение: Учреждение образования
«Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники»
ЛИ №02330/0056964 от 01.04.2004. ЛП №02330/0131666 от 30.04.2004.
220013, Минск, П. Бровки, 6