

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

Кафедра физики

## ***РЕШЕНИЕ ЗАДАЧ ПО КВАНТОВОЙ ФИЗИКЕ***

*Рекомендовано УМО по образованию в области информатики  
и радиоэлектроники в качестве пособия для специальностей,  
закрепленных за УМО по образованию  
в области информатики и радиоэлектроники*

Минск БГУИР 2014

УДК 530.145(076)

ББК 22.314я73

Р47

**А в т о р ы:**

Е. В. Андрианова, Е. В. Андрос, З. А. Боброва, Т. И. Полочанская,  
Н. В. Русина

**Р е ц е н з е н т ы:**

кафедра математики и физики учреждения образования  
«Высший государственный колледж связи»  
(протокол №4 от 14.11.2013);

главный научный сотрудник кафедры физики твердого тела  
Белорусского государственного университета,  
доктор физико-математических наук,  
профессор Н. Т. Квасов

**Решение** задач по квантовой физике : пособие / Е. В. Андрианова [и др.]. –  
Р47 Минск : БГУИР, 2014. – 68 с. : ил.  
ISBN 978-985-543-035-4.

Пособие предназначено для оказания помощи студентам в изучении квантовой физики, организации самостоятельной работы студентов по указанному курсу. Полностью соответствует типовой программе по физике для высших учебных заведений по специальностям информатики и радиоэлектроники. Включает краткое изложение теоретического материала по темам «Тепловое излучение», «Внешний фотоэффект. Характеристики фотона. Эффект Комптона», «Волновые свойства микрочастиц. Гипотеза де Бройля. Соотношение неопределенностей», «Уравнение Шрёдингера. Смысл  $\Psi$ -функции. Частица в потенциальной яме», «Прохождение частиц через потенциальный барьер», «Свойства атомов»; примеры решения задач и задачи для самостоятельного решения (с ответами) по вышеуказанным темам.

**УДК 530.145(076)**  
**ББК 22.314я73**

**ISBN 978-985-543-035-4**

© УО «Белорусский государственный  
университет информатики  
и радиоэлектроники», 2014

## СОДЕРЖАНИЕ

Введение.....	4
1. Тепловое излучение.....	6
1.1. Основные характеристики теплового излучения.....	6
1.2. Основные законы теплового излучения.....	7
1.3. Примеры решения задач.....	10
1.4. Задачи для самостоятельного решения.....	14
2. Внешний фотоэффект. Характеристики фотона. Эффект Комптона.....	15
2.1. Экспериментальные закономерности внешнего фотоэффекта.....	16
2.2. Характеристики фотона. Эффект Комптона.....	17
2.3. Примеры решения задач.....	19
2.4. Задачи для самостоятельного решения.....	24
3. Волновые свойства микрочастиц. Гипотеза де Бройля. Соотношение неопределенностей.....	26
3.1. Примеры решения задач.....	27
3.2. Задачи для самостоятельного решения.....	30
4. Уравнение Шрёдингера. Смысл $\Psi$ -функции. Частица в потенциальной яме.....	31
4.1. Примеры решения задач.....	33
4.2. Задачи для самостоятельного решения.....	48
5. Прохождение частиц через потенциальный барьер.....	50
5.1. Примеры решения задач.....	55
6. Свойства атомов.....	58
6.1. Примеры решения задач.....	62
6.2. Задачи для самостоятельного решения.....	65
Литература.....	67

## ВВЕДЕНИЕ

Квантовая физика – один из наиболее интересных и в то же время сложных для восприятия студентов разделов общей физики. Процессы, происходящие на уровне микромира, невозможно представить, они не подчиняются «здравому смыслу», сформированному в рамках логики существования макромира. Многие свойства квантовых систем кажутся неправдоподобными (например, отсутствие траектории у микрочастицы, невозможность одновременно определить координату и импульс квантового объекта, туннельный эффект). Малая наглядность и сложный математический аппарат создают определенные трудности в преподавании данного раздела физики.

При этом значение квантовой физики в образовании студентов технических вузов (в том числе БГУИР) трудно переоценить, поскольку квантовые эффекты находят все большее применение в современной технике.

В пособии рассмотрены темы «Тепловое излучение», «Внешний фотоэффект. Характеристики фотона. Эффект Комптона», «Волновые свойства микрочастиц. Гипотеза де Бройля. Соотношение неопределенностей», «Уравнение Шрёдингера. Смысл  $\Psi$ -функции. Частица в потенциальной яме», «Прохождение частиц через потенциальный барьер», «Свойства атомов», которые составлены в соответствии с учебной программой и содержат задания к предусмотренным учебными планами практическим занятиям по физике.

В каждой главе представлен теоретический и практический материал.

Теоретическая часть пособия содержит достаточное количество информации, необходимой для реализации практической составляющей.

Практическая часть включает примеры решения задач, а также задачи (с ответами) для самостоятельной работы студентов. Предлагаемые задания будут способствовать рациональной организации самостоятельной учебной работы студентов по овладению программным материалом, повышению качества их подготовки к занятиям, а также более эффективному проведению самих занятий.

Пособие отличается строго научным и вместе с тем доступным изложением теоретического материала, большим количеством визуального сопровождения.

Наибольший интерес в пособии представляет глава, раскрывающая содержание темы «Основы нерелятивистской квантовой механики». Особенностью решения задач в рамках рассматриваемой темы (например, при описании поведения частицы в потенциальной яме) является то, что в большом количестве случаев приходится совершать определенный порядок действий, но в учебно-методической литературе четко описанного алгоритма не предложено.

Авторы представили строгий алгоритм, включающий десять позиций, следуя которому, можно решить любую типичную задачу.

Данное пособие может быть использовано студентами всех форм обучения: очной (дневной, вечерней), заочной, дистанционной.

Библиотека БГУИР

# 1. ТЕПЛОВОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ

*Тепловое излучение* – это излучение телами электромагнитных волн за счет внутренней энергии. Тепловое излучение – единственный вид излучения, который может находиться в термодинамическом равновесии с излучающим телом. Создается колебаниями ионов около положения равновесия.

## 1.1. Основные характеристики теплового излучения

*Энергетическая светимость тела*  $R_T$  – физическая величина, являющаяся функцией температуры и численно равная энергии, испускаемой телом в единицу времени с единицы площади поверхности по всем направлениям и по всему диапазону частот:  $R_T = \frac{W}{tS}$ .

Иначе  $R_T = \int_0^\infty r_{\omega,T} d\omega$  или  $R_T = \int_0^\infty r_{\lambda,T} d\lambda$ , где  $r_{\omega,T}$  и  $r_{\lambda,T}$  – *излучательная (испускательная) способность тела или спектральная плотность энергетической светимости*.

*Спектральная плотность энергетической светимости*  $r_{\omega,T}$  ( $r_{\lambda,T}$ ) – функция частоты и температуры, характеризующая распределение энергии излучения по всему спектру частот (или длин волн), – величина, равная отношению энергетической светимости  $dR_T$ , приходящейся на малый спектральный интервал  $d\omega$  ( $d\lambda$ ), заключенный между  $\omega$  и  $\omega + d\omega$  ( $\lambda$  и  $\lambda + d\lambda$ ), к ширине этого интервала:  $r_{\omega,T} = \frac{dR_{T,\omega}}{d\omega}$  ( $r_{\lambda,T} = \frac{dR_{T,\lambda}}{d\lambda}$ ).

*Поглощательная способность* тела – функция частоты и температуры, показывающая, какая часть энергии электромагнитного излучения, падающего на тело, поглощается телом в области частот  $d\omega$  вблизи  $\omega$ :  $a_{\omega,T} = \frac{W_{\text{погл}}}{W_{\text{пад}}}$ .

*Абсолютно черное тело* – это физическая абстракция (модель), под которой понимают тело, полностью поглощающее все падающее на него электромагнитное излучение. Для абсолютно черного тела поглощательная способность равна единице:  $a_{\omega,T}^* = 1$ .

Если тело вообще не поглощает энергию излучения, т. е. его поглощательная способность  $a_{\omega,T} = 0$ , то его называют *абсолютно белым*.

В природе не существует абсолютно черных и абсолютно белых тел. Поглощательная способность реальных объектов может меняться в пределах

$0 < a_{\omega, T} < 1$ . Такие тела называют *серыми*. Если отличия от крайних значений не очень велики, то ими можно пренебречь в условиях конкретного рассмотрения, и считать такие тела абсолютными.

## 1.2. Основные законы теплового излучения

### Закон Стефана – Больцмана.

Энергетическая светимость абсолютно черного тела прямо пропорциональна четвертой степени абсолютной температуры:  $R_T^* = \sigma T^4$ , где  $\sigma = 5,7 \cdot 10^{-8}$  Вт/(м<sup>2</sup> · К<sup>4</sup>) – постоянная Стефана – Больцмана.

### Закон смещения Вина.

В спектре излучения абсолютно черного тела длина волны, на которую приходится максимум излучательной способности, обратно пропорциональна абсолютной температуре тела:  $\lambda_{\max} = \frac{b}{T}$ , где  $b = 2,9 \cdot 10^{-3}$  м · К – постоянная Вина.

Используя этот закон, можно измерять температуру удаленных объектов, а также температуру очень нагретых тел.

### Закон Кирхгофа.

Отношение излучательной способности любого тела к его поглощательной способности одинаково для всех тел при данной температуре для данной частоты и не зависит от их формы и химической природы, т. е. является универсальной функцией длины волны (частоты излучения) и температуры:

$$\frac{r_{\omega, T}}{a_{\omega, T}} = f(\omega, T) \text{ или } \frac{r_{\lambda, T}}{a_{\lambda, T}} = f(\lambda, T).$$

Поскольку для абсолютно черного тела  $a_{\omega, T}^* = 1$ , универсальная функция Кирхгофа выражает излучательную способность абсолютно черного тела:

$$f(\omega, T) = r_{\omega, T}^*.$$

Выражение для универсальной функции Кирхгофа было получено Рэлеем и Джинсом в рамках классической статистики:  $f(\omega, T) = \frac{\omega^2}{4\pi^2 c^2} kT$ .

Полученное выражение правильно описывало низкочастотную часть спектра, при средних частотах приводило к резкому расхождению с экспериментом, а при высоких – к абсурдному результату (рис. 1).

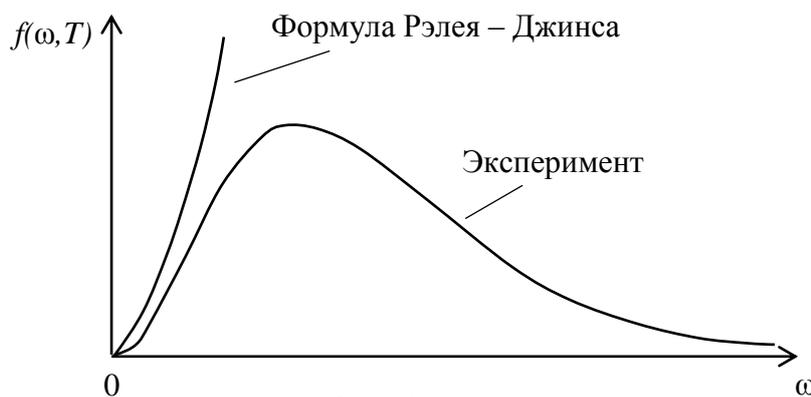


Рис. 1

Невозможность классической физики теоретически объяснить экспериментальные данные по тепловому излучению получила название «ультрафиолетовой катастрофы».

Обилие законов, описывающих различные стороны одного объекта исследования, но не дающих представления о целом, говорило о кризисе науки в данном направлении и свидетельствовало о неверных подходах к решению проблемы.

Немецкий физик М. Планк в 1900 г. предложил принципиально новый подход: рассматривать тепловое излучение не как электромагнитные волны, а как поток частиц (*квантов*), энергия которых пропорциональна частоте излучения:  $E = h\nu = \hbar\omega$ , где  $h = 6,63 \cdot 10^{-34}$  Дж·с – постоянная Планка;  $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,054 \cdot 10^{-34}$  Дж·с – приведенная постоянная Планка.

На основании квантовых взглядов на природу излучения Планком было получено другое выражение для универсальной функции Кирхгофа, которое «работало» адекватно для всех частот:  $f(\omega, T) = \frac{\hbar\omega^3}{4\pi^2c^2} \cdot \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}$ .

Формула Планка для спектральной плотности энергетической светимости абсолютно черного тела фактически объединила в себе все экспериментальные законы теплового излучения.

**Используя формулу Планка, получим закон Стефана – Больцмана.**

Интегральная энергетическая светимость  $R_T = \int_0^\infty r_{\omega,T} d\omega$ . Для абсолютно черного тела  $f(\omega, T) = r_{\omega,T}^*$ .

Подставим выражение для  $f(\omega, T)$ :

$$\int_0^\infty f(\omega, T) d\omega = \int_0^\infty \frac{\hbar\omega^3}{4\pi^2c^2} \cdot \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} d\omega = \left. \begin{array}{l} \text{Произведем замену:} \\ x = \frac{\hbar\omega}{kT}, \text{ тогда } dx = \frac{\hbar}{kT} d\omega; \\ \omega = \frac{kT}{\hbar} x, \text{ тогда } d\omega = \frac{kT}{\hbar} dx \end{array} \right| =$$

$$= \int_0^\infty \frac{\hbar k^3 T^3}{4\pi^2 c^2 \hbar^3} \cdot \frac{x^3 kT}{e^x - 1} dx = \frac{k^4 T^4}{4\pi^2 c^2 \hbar^3} \int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \frac{k^4 T^4}{4\pi^2 c^2 \hbar^3} \cdot \frac{\pi^4}{15} = \frac{k^4 2\pi^5}{15 c^2 \hbar^3} T^4 = \sigma T^4.$$

Таким образом,  $R_T^* = \sigma T^4$ , где  $\sigma = 5,7 \cdot 10^{-8} \text{ Вт}/(\text{м}^2 \cdot \text{К}^4)$  – постоянная Стефана – Больцмана.

**Используя формулу Планка, получим закон Рэля – Джинса.**

Для больших частот  $\hbar\omega \gg kT$ , тогда  $e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1 \approx e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}$ .

Разложим функцию  $e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}$  в ряд Тейлора:

$$e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} = 1 + \frac{1}{1!} \frac{\hbar\omega}{kT} + \frac{1}{2!} \left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right)^2 + \frac{1}{3!} \left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right)^3 + \dots$$

Учитывая, что сумма  $\frac{1}{2!} \left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right)^2 + \frac{1}{3!} \left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right)^3 + \dots$  стремится к нулю, получим  $e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1 \approx \frac{\hbar\omega}{kT}$ .

Тогда универсальная функция примет вид

$$f(\omega, T) = \frac{\hbar\omega^3}{4\pi^2 c^2} \cdot \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} = \frac{\hbar\omega^3}{4\pi^2 c^2} \cdot \frac{kT}{\hbar\omega} = \frac{\omega^2}{4\pi^2 c^2} kT.$$

Таким образом,  $f(\omega, T) = \frac{\omega^2}{4\pi^2 c^2} kT$ .

**Используя формулу Планка, получим закон смещения Вина.**

Перейдем от переменной  $\omega$  к переменной  $\lambda$ :

$$\begin{cases} f(\omega, T) = \frac{dW_{\text{изл}}}{d\omega} \\ f(\lambda, T) = \frac{dW_{\text{изл}}}{d\lambda} \end{cases}, \text{ откуда } f(\omega, T)d\omega = f(\lambda, T)d\lambda,$$

$$\text{Тогда } \left| \frac{d\omega}{d\lambda} \right| = \left| \frac{d\left(\frac{2\pi c}{\lambda}\right)}{d\lambda} \right| = \left| \frac{-2\pi c}{\lambda^2} \right| = \frac{2\pi c}{\lambda^2}.$$

$$f(\lambda, T) = f(\omega, T) \frac{d\omega}{d\lambda} = \frac{2\pi c}{\lambda^2} \cdot \frac{\hbar\omega^3}{4\pi^2 c^2} \cdot \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} = \frac{4\pi^2 \hbar c^2}{\lambda^5} \cdot \frac{1}{e^{\frac{2\pi \hbar c}{\lambda kT}} - 1}.$$

Исследуем полученную функцию на экстремум.

Найдем первую производную функции  $f(\lambda, T)$  и приравняем ее к нулю:

$$\frac{df(\lambda, T)}{d\lambda} = \frac{4\pi^2 \hbar c^2 (-5)}{\lambda^6} \cdot \frac{1}{e^{\frac{2\pi \hbar c}{\lambda kT}} - 1} + \frac{4\pi^2 \hbar c^2}{\lambda^5} \cdot \frac{1}{(e^{\frac{2\pi \hbar c}{\lambda kT}} - 1)^2} e^{\frac{2\pi \hbar c}{\lambda kT}} \frac{2\pi \hbar c}{\lambda^2 kT} =$$

$$= \left| \begin{array}{l} \text{Произведем замену:} \\ \frac{2\pi\hbar c}{\lambda kT} = x \end{array} \right| = \frac{4\pi^2\hbar c^2}{\lambda^6} \left( \frac{-5}{e^x-1} + \frac{e^x}{(e^x-1)^2} \cdot x \right) = 0;$$

$$-5(e^x - 1) + e^x \cdot x = 0.$$

Получили трансцендентное уравнение, которое проще всего решить графически. Преобразуем полученное выражение:

$$-5e^x + 5 + e^x \cdot x = 0; \quad 5 + e^x(x - 5) = 0;$$

$$e^x = -\frac{5}{x-5}.$$

Графиком функции  $f(x) = e^x$  является экспонента, функции  $f(x) = -\frac{5}{x-5}$  – гипербола. Графики пересекаются в точке с координатой  $x \approx 4,965$ . Тогда  $\frac{2\pi\hbar c}{\lambda_{\max} kT} = 4,965$ , откуда  $\lambda_{\max} = \frac{2\pi\hbar c}{4,965 kT} = \frac{b}{T}$ , где  $b = 2,9 \cdot 10^{-3} \text{ м} \cdot \text{К}$  – постоянная Вина.

Проверим, соответствует ли данная точка максимуму функции  $f(\lambda, T)$ . Для этого возьмем вторую производную:

$$f''(\lambda, T) = \left( \frac{4\pi^2\hbar c^2}{\lambda^6} \cdot \left( \frac{-5}{e^x-1} + \frac{e^x}{(e^x-1)^2} \cdot x \right) \right)' =$$

$$= \frac{4\pi^2\hbar c^2}{\lambda^6} \cdot \frac{5e^x}{(e^x-1)^2} - \frac{e^x((e^x-1)(x+1) - 2xe^x)}{(e^x-1)^3}.$$

Подставим найденное значение  $x \approx 4,965$ :

$$f''(\lambda, T) \approx -0,0068 < 0.$$

Так как вторая производная функции  $f''(\lambda, T) < 0$ , то найденная точка соответствует максимуму, что и требовалось, исходя из экспериментального закона смещения Вина.

$$\text{Таким образом, } \lambda_{\max} = \frac{b}{T}.$$

### 1.3. Примеры решения задач

**1.** Какую температуру должно иметь тело, если оно при температуре окружающей среды  $17^\circ\text{C}$  излучает в 100 раз больше энергии, чем поглощает?

**Решение.** Энергия, излучаемая телом со всей поверхности по всем направлениям за время  $dt$ , равна:  $dW_{\text{изл.телом}} = R_{\text{тела}} S dt$ .

Энергия, поглощаемая всей поверхностью тела за время  $dt$ , равна энергии, излучаемой средой за тот же промежуток времени:

$dW_{\text{погл.телом}} = dW_{\text{изл.средой}} = R_{\text{среды}} S dt$ , где  $S$  – площадь поверхности тела.

$$\text{По условию } \frac{dW_{\text{изл.телом}}}{dW_{\text{погл.телом}}} = \frac{R_{\text{тела}} S dt}{R_{\text{среды}} S dt} = \frac{R_{\text{тела}}}{R_{\text{среды}}} = 100. \quad (1)$$

Выразим энергетическую светимость тела и среды через закон Стефана – Больцмана и подставим полученные выражения в формулу (1):

$$R_{\text{тела}} = \sigma T_{\text{тела}}^4; R_{\text{среды}} = \sigma T_{\text{среды}}^4;$$

$$\frac{\sigma T_{\text{тела}}^4}{\sigma T_{\text{среды}}^4} = \frac{T_{\text{тела}}^4}{T_{\text{среды}}^4} = 100.$$

$$\text{Откуда } T_{\text{тела}} = T_{\text{среды}} \sqrt[4]{100}; T_{\text{тела}} = 290 \text{ К} \cdot \sqrt[4]{100} = 917 \text{ К}.$$

**Ответ:** 917 К.

2. Печь, потребляющая мощность  $P = 1$  кВт, имеет отверстие площадью  $S = 100 \text{ см}^2$ . Определить КПД мощности, рассеиваемой стенками печи, если температура ее внутренней поверхности равна 1 кК.

**Решение.** КПД мощности, рассеиваемой стенками печи, равен отношению мощности, рассеянной стенками к полной мощности, потребляемой печью:

$$\eta = \frac{P_{\text{рассеян}}}{P} = \frac{P - P_{\text{изл}}}{P} = \frac{P - RS}{P} = \frac{P - \sigma T^4 S}{P};$$
$$\eta = \frac{1000 \text{ Вт} - 5,67 \cdot 10^{-8} \text{ Вт}/(\text{м}^2 \cdot \text{К}^4) \cdot 10^{12} \text{ К}^4 \cdot 10^{-2} \text{ м}^2}{1000 \text{ Вт}} = 0,433.$$

**Ответ:**  $\eta = 0,433$ .

3. Средняя энергетическая светимость  $R_{T(\text{Земли})}$  поверхности Земли равна  $0,54 \text{ Дж}/(\text{см}^2 \cdot \text{мин})$ . Какова должна быть температура  $T$  поверхности Земли, если условно считать, что она излучает как серое тело с коэффициентом излучения  $\varepsilon = 0,25$ ?

**Решение.** Коэффициент излучения  $\varepsilon$  (или степень черноты) показывает отношение энергии теплового излучения серого тела согласно закону Стефана – Больцмана, к излучению абсолютно черного тела при той же температуре. Коэффициент излучения абсолютно черного тела  $\varepsilon = 1$ .

Энергетическая светимость поверхности Земли равна  $R_{T(\text{Земли})} = \varepsilon R_T^* = \varepsilon \sigma T^4$ .

$$\text{Откуда } T = \sqrt[4]{\frac{R_T(\text{Земли})}{k\sigma}}; T = \sqrt[4]{\frac{\frac{0,54 \cdot 10^4}{60} \text{ Дж}/(\text{см}^2 \cdot \text{с})}{0,255,67 \cdot 10^{-8} \text{ Вт}/(\text{м}^2 \cdot \text{К}^4)}} = 282 \text{ К} = 9 \text{ }^\circ\text{С}.$$

**Ответ:** 282 К.

4. Излучение Солнца по своему спектральному составу близко к излучению абсолютно черного тела, для которого максимум испускательной способности приходится на длину волны  $\lambda_{\max} = 0,48 \text{ мкм}$ . Найти массу, теряемую Солнцем каждую секунду за счет этого излучения. Оценить время, за которое масса Солнца уменьшится на 1 %.

**Решение.** Найдем массу, теряемую Солнцем за 1 с.

Энергия излучения Солнца, согласно формуле Эйнштейна, равна  $W = mc^2$ , где  $m$  – масса Солнца, теряемая за счет излучения.

Энергетическая светимость Солнца равна  $R_T = \frac{W}{tS}$ , откуда  $W = RtS$ . Тогда

$$m = \frac{W}{c^2} = \frac{R_T t S}{c^2} = \left| \begin{array}{l} \text{Согласно закону Стефана – Больцмана} \\ R_T = \sigma T^4 \end{array} \right| = \frac{\sigma T^4 t S}{c^2} =$$

$$= \left| \begin{array}{l} \text{Согласно закону смещения Вина} \\ T = \frac{b}{\lambda} \end{array} \right| = \frac{\sigma b^4 t S}{\lambda^4 c^2} =$$

$$= \left| \begin{array}{l} \text{Площадь поверхности Солнца равна } S = 4\pi R^2, \\ \text{где } R = 6,95 \cdot 10^8 \text{ м – радиус Солнца} \end{array} \right| = \frac{\sigma b^4 t 4\pi R^2}{\lambda^4 c^2}.$$

Таким образом,

$$m = \frac{5,67 \cdot 10^{-8} \text{ Вт}/(\text{м}^2 \cdot \text{К}^4) \cdot (2,9 \cdot 10^{-3} \text{ м} \cdot \text{К})^4 \cdot 1 \text{ с} \cdot 4 \cdot 3,14 \cdot (6,95 \cdot 10^8 \text{ м})^2}{(0,48 \cdot 10^{-6} \text{ м})^4 \cdot (3 \cdot 10^8 \text{ м}/\text{с})^2} = 5,09 \cdot 10^9 \text{ кг}.$$

Оценим время, за которое масса Солнца уменьшится на 1 %:

$$\tau = \frac{\Delta mc^2}{R_T S} = \frac{0,01 M_{\text{С}} c^2}{\sigma T^4 4\pi R^2} = \frac{0,01 M_{\text{С}} c^2}{\sigma \left(\frac{b}{\lambda_{\max}}\right)^4 \cdot 4\pi R^2};$$

$$\tau = \frac{0,01 \cdot 1,98 \cdot 10^{30} \text{ кг} \cdot (3 \cdot 10^8 \text{ м}/\text{с})^2 \cdot (0,48 \cdot 10^{-6} \text{ м})^4}{5,67 \cdot 10^{-8} \text{ Вт}/(\text{м}^2 \cdot \text{К}^4) \cdot (2,9 \cdot 10^{-3} \text{ м} \cdot \text{К})^4 \cdot 4 \cdot 3,14 \cdot (6,95 \cdot 10^8 \text{ м})^2} = 1,2 \cdot 10^{11} \text{ лет}.$$

**Ответ:**  $m = 5,09 \cdot 10^9 \text{ кг}$ ;  $\tau = 1,2 \cdot 10^{11} \text{ лет}$ .

5. Абсолютно черное тело находится при температуре  $T_1 = 2900 \text{ К}$ . В результате остывания тела длина волны, на которую приходится максимум спектральной плотности энергетической светимости, изменилась на  $\Delta\lambda = 9 \text{ мкм}$ . До какой температуры  $T_2$  охладилось тело?

**Решение.** Запишем закон смещения Вина для двух случаев:

$$\begin{cases} \lambda_{1\max} = \frac{b}{T_1}, \\ \lambda_{2\max} = \frac{b}{T_2} \end{cases} \text{ ИЛИ } \begin{cases} b = \lambda_{1\max} \cdot T_1, \\ b = \lambda_{2\max} \cdot T_2. \end{cases}$$

Учитывая, что  $\Delta\lambda = \lambda_{2\max} - \lambda_{1\max}$ , получим  $b = \lambda_{2\max} \cdot T_2$ ;

$$b = (\lambda_{1\max} + \Delta\lambda)T_2; \quad b = \left(\frac{b}{T_1} + \Delta\lambda\right)T_2;$$

$$T_2 = \frac{b}{\frac{b}{T_1} + \Delta\lambda} = \frac{bT_1}{b + T_1\Delta\lambda};$$

$$T_2 = \frac{2,9 \cdot 10^{-3} \text{ м} \cdot \text{К} \cdot 2900 \text{ К}}{2,9 \cdot 10^{-3} \text{ м} \cdot \text{К} + 2900 \text{ К} \cdot 9 \cdot 10^{-6} \text{ м}} = 290 \text{ К}.$$

**Ответ:** 290 К.

**6.** Медный шарик диаметром 1,2 см поместили в откачанный сосуд, температура стенок которого 0 К. Начальная температура шарика  $T_0 = 300 \text{ К}$ . Считая поверхность шарика абсолютно черным телом, найти, через сколько времени его температура уменьшится в два раза.

**Решение.**  $dW = -dU$  – убыль внутренней энергии шарика при остывании на температуру  $dT$ .

Изменение внутренней энергии тела при нагревании/охлаждении выражается формулой  $dU = CdT$ , где  $C$  – теплоемкость тела.

$$C = cm = c\rho V = c\rho \frac{4}{3}\pi r^3 = \frac{\pi d^3}{6}c\rho, \text{ где } r \text{ – радиус; } d \text{ – диаметр шарика;}$$

$c = 390 \text{ Дж}/(\text{кг} \cdot \text{К})$  – удельная теплоемкость меди;  $\rho = 8900 \text{ кг}/\text{м}^3$  – плотность меди.

$$\text{Тогда } dW = -\frac{\pi d^3}{6}c\rho dT.$$

$dW = R_T^* S dt = \sigma T^4 \pi d^2 dt$  – энергия, испускаемая всей поверхностью шарика за время  $dt$ .

Приравняем полученные выражения:

$$-\frac{\pi d^3}{6}c\rho dT = \sigma T^4 \pi d^2 dt.$$

Получили дифференциальное уравнение с двумя переменными. Решим уравнение и найдем время, через которое температура шарика уменьшится в два раза:

$$-\frac{d}{6} c\rho dT = \sigma T^4 dt;$$

$$dt = -\frac{dc\rho}{6\sigma} \cdot \frac{dT}{T^4};$$

$$\int_0^\tau dt = -\frac{dc\rho}{6\sigma} \int_{T_0}^{\frac{T_0}{2}} \frac{dT}{T^4};$$

$$\tau = -\frac{dc\rho}{6\sigma} \cdot \left(-\frac{1}{3T^3}\right) \Big|_{T_0}^{\frac{T_0}{2}} = \frac{7dc\rho}{18\sigma T_0^3};$$

$$\tau = \frac{7 \cdot 1,2 \cdot 10^{-2} \text{ м} \cdot 390 \text{ Дж}/(\text{кг} \cdot \text{К}) \cdot 8900 \text{ кг}/\text{м}^3}{18 \cdot 5,67 \cdot 10^{-8} \text{ Вт}/(\text{м}^2 \cdot \text{К}^4) \cdot 9 \cdot 10^6 \text{ К}^3} = 10,525 \cdot 10^3 \text{ с} \approx 2,9 \text{ ч.}$$

**Ответ:**  $\approx 3$  ч.

#### 1.4. Задачи для самостоятельного решения

1. Абсолютно черное тело имеет температуру  $T_1 = 500$  К. Какова будет температура  $T_2$  тела, если в результате нагревания поток излучения увеличится в  $n = 5$  раз?

**Ответ:** 747,6 К.

2. Исследование спектра излучения Солнца показывает, что максимум спектральной плотности энергетической светимости соответствует длине волны  $\lambda_{\max} = 5000 \text{ \AA}$ . Принимая Солнце за абсолютно черное тело, определить: 1) энергетическую светимость Солнца; 2) поток энергии, излучаемый Солнцем.

**Ответ:**  $R_T^* = 6,4 \cdot 10^7 \text{ Вт}/\text{м}^2$ ;  $\Phi = 3,9 \cdot 10^{26} \text{ Вт}$ .

3. Как и во сколько раз изменится поток излучения абсолютно черного тела, если максимум энергии излучения переместится с красной границы видимого спектра ( $\lambda_{1\max} = 780 \text{ нм}$ ) на фиолетовую ( $\lambda_{2\max} = 390 \text{ нм}$ )?

**Ответ:** увеличится в 16 раз.

4. Определить поглощательную способность  $a_{\omega, T}$  серого тела, для которого температура, измеренная радиационным пирометром  $T_{\text{рад}} = 1,4 \text{ кК}$ , тогда как истинная температура тела равна 3,2 кК.

**Ответ:** 0,037.

5. Из смотрового окошечка печи излучается поток  $\Phi = 4$  кДж/мин. Определить температуру печи, если площадь окошечка  $S = 8$  см<sup>2</sup>.

**Ответ:** 1049 К.

6. При увеличении температуры абсолютно черного тела в два раза длина волны, на которую приходится максимум испускательной способности тела, сместилась на  $\Delta\lambda = 400$  нм. Найти начальную и конечную температуру тела.

**Ответ:**  $T_1 = 3625$  К;  $T_2 = 7250$  К.

7. Найти мощность электрической лампочки, если температура нити равна 2650 К, площадь поверхности лампочки 47 мм<sup>2</sup>, а отношение энергетической светимости нити лампочки к энергетической светимости абсолютно черного тела при той же температуре  $k$  равно 0,31.

**Ответ:** 40,7 Вт.

8. Какая часть энергии Солнца рассеивается атмосферой, если длина волны, на которую приходится максимум излучательной способности  $\lambda_{\max}$ , за пределами атмосферы равна 0,50 мкм, а на поверхности Земли – 0,55 мкм?

**Ответ:** 0,32.

9. Принимая коэффициент теплового излучения  $\epsilon$  угля при температуре  $T = 600$  К равным 0,8, определить: 1) энергетическую светимость угля; 2) энергию, излучаемую с поверхности угля площадью  $S = 5$  см<sup>2</sup> за время  $t = 10$  мин.

**Ответ:**  $R = 5,88$  кВт/м<sup>2</sup>,  $W = 1,76$  кДж.

## 2. ВНЕШНИЙ ФОТОЭФФЕКТ. ХАРАКТЕРИСТИКИ ФОТОНА. ЭФФЕКТ КОМПТОНА

*Внешний фотоэффект (фотоэлектронная эмиссия)* – явление испускания электронов с поверхности твердых или жидких тел под действием электромагнитного излучения (света).

Внешний фотоэффект был открыт в 1887 г. немецким физиком Г. Герцем, экспериментально исследован русским ученым А. Г. Столетовым в 1888–1899 гг.

Основным элементом установки для исследования закономерностей внешнего фотоэффекта является фотоэлемент, который представляет собой стеклянный сосуд с двумя электродами, между которыми источники тока создают разность потенциалов. В отсутствие света, падающего на катод, между электродами фотоэлемента нет свободных носителей заряда, т. е. электрическая цепь разомкнута. При освещении катода из его поверхности под действием света

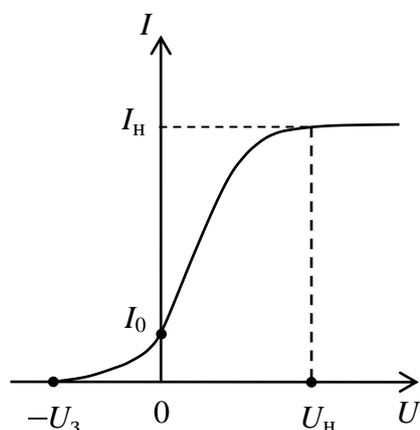


Рис. 2

испускаются электроны, называемые фотоэлектронами. При достижении фотоэлектронами анода в цепи возникает электрический ток (фототок). Разность потенциалов между анодом и катодом (или напряжение) можно регулировать по величине и знаку. Если  $U > 0$ , то между электродами возникает ускоряющее для фотоэлектронов электростатическое поле, при  $U < 0$  это электростатическое поле оказывает на фотоэлектроны тормозящее действие.

*Вольт-амперная характеристика фотоэлемента* – зависимость силы фототока от напряжения (разности потенциалов между катодом и анодом)  $I(U)$  при заданном световом потоке ( $\Phi = \text{const}$ ) (рис. 2), где  $I_n$  – сила тока насыщения;  $U_3$  – задерживающее напряжение.

## 2.1. Экспериментальные закономерности внешнего фотоэффекта

1. Сила тока насыщения прямо пропорциональна интенсивности падающего света и не зависит от его частоты.
2. Величина задерживающего напряжения прямо пропорциональна частоте падающего света и не зависит от его интенсивности.
3. Для каждого вещества существует своя наименьшая частота  $\nu_{\text{кр}}$  (соответствующая ей наибольшая длина волны  $\lambda_{\text{кр}}$ ), называемая красной границей фотоэффекта, при которой фотоэффект уже (еще) возможен.
4. Фотоэффект практически безынерционен.

Теоретическое обоснование явления внешнего фотоэффекта дал в 1905 г. А. Эйнштейн на основании *квантовых представлений* М. Планка об электромагнитном излучении, предположив, что свет поглощается и распространяется также квантами (кванты света впоследствии были названы *фотонами*).

Уравнение Эйнштейна для фотоэффекта:  $\hbar\omega = A_{\text{вых}} + W_{\text{max}}^k$ , где  $\hbar\omega = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$  – энергия фотона, которая расходуется на выбивание электрона из вещества ( $A_{\text{вых}}$  – работа выхода электрона с поверхности вещества – минимальная энергия, необходимая электрону для освобождения из вещества в вакуум), а оставшаяся ее часть идет на сообщение кинетической энергии электрону ( $W_{\text{max}}^k$  – максимальная кинетическая энергия фотоэлектрона).

На основании теории Эйнштейна для фотоэффекта можно дать следующую интерпретацию экспериментальных закономерностей фотоэффекта:

1. Количество вырываемых фотоэлектронов в единицу времени прямо пропорционально интенсивности падающего света и не зависит от его частоты.

2. Максимальная кинетическая энергия фотоэлектронов прямо пропорциональна частоте падающего света и не зависит от его интенсивности. При этом  $W_{\text{max}}^k = |eU_3|$ , где  $e = 1,6 \cdot 10^{-19}$  Кл – элементарный электрический заряд.

3. Энергии фотона с минимальной частотой  $\nu_{\text{кр}}$  (граничной длиной волны  $\lambda_{\text{кр}}$ ) хватает только на совершение электроном работы выхода с поверхности вещества:  $h\nu_{\text{кр}} = \frac{hc}{\lambda_{\text{кр}}} = A_{\text{вых}}$ .

Фотоэффект реализуется для фотонов с энергиями, не превышающими 1 МэВ. Пренебрегая  $A_{\text{вых}} \ll 1$  МэВ, оценим скорость фотоэлектронов:

$$\frac{m\vartheta^2}{2} = 1 \text{ МэВ} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Дж};$$

$\vartheta = 5,96 \cdot 10^5$  м;  $\vartheta \ll c$ , где  $c = 3 \cdot 10^8$  м/с – скорость света в вакууме.

Таким образом, вероятность релятивистских скоростей для фотоэлектронов ничтожно мала.

## 2.2. Характеристики фотона. Эффект Комптона

1. Энергия.  $E = h\nu = \hbar\omega$ .

2. Импульс. Поскольку свет ведет себя как поток частиц (фотонов), но при этом все же является электромагнитной волной, которая распространяется в вакууме со скоростью  $c = 3 \cdot 10^8$  м/с, то импульс фотона, как релятивистской частицы, равен  $p = \frac{E}{c} = \frac{\hbar\omega}{c} = \hbar \frac{2\pi}{\lambda} = \hbar k$ , где  $k = \frac{2\pi}{\lambda}$  – волновое число. Тогда вектор импульса фотона  $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ , где  $\vec{k}$  – волновой вектор.

3. Масса покоя фотона равна нулю. Фотон существует только в движении со скоростью света  $c$  во всех системах отсчета.

Таким образом, свет обнаруживает двойственность свойств – *корпускулярно-волновой дуализм*. В одних явлениях проявляется его волновая природа, в других – корпускулярные свойства, и он ведет себя как поток фотонов.

*Эффект Комптона* – явление рассеяния (отклонения от первоначального направления движения) фотонов на *свободных покоящихся электронах*. Был обнаружен и исследован в 1922–1923 гг. А. Комптоном.

В веществе электроны обычно связаны с атомами или ионами, но энергия связи ( $A_{\text{вых}}$ ) имеет значения порядка нескольких электронвольт. Эффект Комптона реализуется при энергиях фотонов не менее сотен электронвольт. В этом случае вполне можно пренебречь энергией связи и считать электрон свободным. Также и импульс таких фотонов гораздо больше импульса электрона. Поэтому можно пренебречь движением электрона и считать его покоящимся.

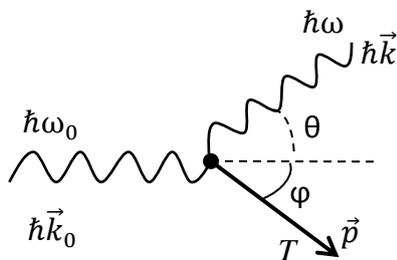


Рис. 3

В этом случае электромагнитная волна так же, как и в случае фотоэффекта, проявляет корпускулярные свойства. Соударение фотона с электроном можно рассматривать как классическое соударение двух шариков (рис. 3) с выполнением законов сохранения энергии и импульса:

$$\begin{cases} \hbar\omega_0 = \hbar\omega + T, \\ \hbar\vec{k}_0 = \hbar\vec{k} + \vec{p}, \end{cases} \text{ где}$$

$\hbar\omega_0$  – энергия падающего фотона;  $\hbar\omega$  – энергия рассеянного фотона;  $T$  – кинетическая энергия электрона отдачи;  $\hbar\vec{k}_0$  – вектор импульса падающего фотона;  $\hbar\vec{k}$  – вектор импульса рассеянного фотона;  $\vec{p}$  – вектор импульса электрона отдачи.

Поскольку эффект Комптона реализуется при больших энергиях фотонов, электрон отдачи, вероятнее всего, будет иметь релятивистские скорости. В этом случае используется релятивистская связь между импульсом и кинетической энергией:  $p^2 c^2 = T(T + 2mc^2)$ .

Используя законы сохранения и связующее релятивистское соотношение, можно получить зависимость изменения длины волны  $\Delta\lambda$  от угла рассеяния  $\theta$  между волновыми векторами фотона  $\vec{k}_0$  и  $\vec{k}$ . Перераспределим слагаемые в законе сохранения импульса:  $\vec{p} = \hbar\vec{k}_0 - \hbar\vec{k}$  и возведем обе части этого выражения в квадрат, для того чтобы избавиться от векторов:

$$p^2 = \hbar^2 k_0^2 + \hbar^2 k^2 - 2\hbar^2 k k_0 \sin\theta.$$

Умножим обе части уравнения на  $c^2$  :  $p^2 c^2 = \hbar^2 c^2 (k_0^2 + k^2 - 2\hbar^2 k k_0 \cos \theta)$ .

С другой стороны,  $p^2 c^2 = T(T + 2mc^2)$ .

Получим  $\hbar^2 c^2 (k_0^2 + k^2 - 2\hbar^2 k k_0 \cos \theta) = T(T + 2mc^2)$ .

Выразим волновой вектор  $k$  через циклическую частоту  $\omega$ :  $k = \frac{\omega}{c}$ , а кинетическую энергию электрона отдачи  $T$  из закона сохранения энергии:  
 $T = \hbar(\omega_0 - \omega)$ .

Тогда  $\hbar^2 c^2 \left( \frac{\omega_0^2}{c^2} + \frac{\omega^2}{c^2} - 2 \frac{\omega \omega_0}{c^2} \cos \theta \right) = \hbar(\omega_0 - \omega)(\hbar(\omega_0 - \omega) + 2mc^2)$ ;

$\hbar(\omega_0^2 + \omega^2 - 2\omega \omega_0 \cos \theta) = (\omega_0 - \omega)(\hbar(\omega_0 - \omega) + 2mc^2)$ ;

$\hbar \omega_0^2 + \hbar \omega^2 - 2\hbar \omega \omega_0 \cos \theta = \hbar \omega_0^2 - 2\hbar \omega \omega_0 + \hbar \omega^2 + 2mc^2(\omega_0 - \omega)$ ;

$2\hbar \omega \omega_0 (1 - \cos \theta) = 2mc^2(\omega_0 - \omega)$ ;

$\frac{\omega_0 - \omega}{\omega \omega_0} = \frac{\hbar}{mc^2} (1 - \cos \theta)$ .

Выразим циклическую частоту  $\omega$  через длину волны  $\lambda$ :  $\omega = \frac{2\pi c}{\lambda}$ .

Следовательно, изменение длины волны фотона в результате комптоновского рассеяния  $\Delta \lambda = \lambda - \lambda_0$  равно  $\Delta \lambda = \frac{2\pi \hbar}{mc} (1 - \cos \theta)$ , где  $\lambda_c = \frac{2\pi \hbar}{mc}$  – комптоновская длина волны электрона;  $m$  – масса электрона.

Эффект Комптона также может наблюдаться и на других частицах. В этом случае при изменении длины волны фотона следует учитывать соответственно их массы.

### 2.3. Примеры решения задач

1. Имеется вакуумный фотоэлемент, один из электродов которого цезиевый, другой – медный. Определить максимальную скорость фотоэлектронов, подлетающих к медному электроду, при освещении цезиевого электрода электромагнитным излучением с длиной волны 0,22 мкм, если электроды замкнуты снаружи накоротко.

**Решение.** Контактная разность потенциалов – разность потенциалов, возникающая между находящимися в электрическом контакте проводниками в условиях термодинамического равновесия:  $\Delta \varphi = \frac{A_{\text{вых.2}} - A_{\text{вых.1}}}{q_e}$ ,

где  $A_{\text{вых.1}} = 1,89$  эВ,  $A_{\text{вых.2}} = 4,47$  эВ – работа выхода электрона с поверхности металла (в данном случае цезия и меди соответственно);  $q_e = -1,6 \cdot 10^{-19}$  Кл – заряд электрона.

Таким образом, цезиевый электрод приобретет положительный заряд, медный – отрицательный.

Запишем уравнение Эйнштейна для фотоэффекта:  $\frac{hc}{\lambda} = A_{\text{вых}} + W_{\text{max}}^k$ . В данном случае  $A_{\text{вых}} = A_{\text{вых.1}}$  – работа выхода электрона из цезиевого электрода, на который падает электромагнитное излучение.

Электростатическое поле, возникающее вследствие контактной разности потенциалов между электродами, будет препятствовать движению электронов от цезиевого электрода к медному, поэтому его работа будет частично компенсировать кинетическую энергию фотоэлектронов:

$W_{\text{max}2}^k = W_{\text{max}1}^k - q_e \Delta\varphi$ , где  $W_{\text{max}1}^k$  – максимальная кинетическая энергия фотоэлектронов, вылетающих с поверхности цезия,  $W_{\text{max}2}^k$  – максимальная кинетическая энергия электронов при достижении анода под действием электростатического поля,  $q_e \Delta\varphi$  – работа электростатического поля.

$$\text{Тогда } W_{\text{max}1}^k = \frac{hc}{\lambda} - A_{\text{вых.1}};$$

$$W_{\text{max}2}^k = \frac{hc}{\lambda} - A_{\text{вых.1}} - q_e \Delta\varphi;$$

$$W_{\text{max}2}^k = \frac{hc}{\lambda} - A_{\text{вых.1}} - q_e \cdot \frac{A_{\text{вых.2}} - A_{\text{вых.1}}}{q_e}.$$

$$\text{Учитывая, что } W_{\text{max}2}^k = \frac{m_e v_{\text{max}}^2}{2}, \text{ получим } v_{\text{max}} = \sqrt{\left(\frac{hc}{\lambda} - A_{\text{вых.2}}\right) \frac{2}{m_e}};$$

$$v_{\text{max}} = \sqrt{\left(\frac{6,63 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с} \cdot 3 \cdot 10^8 \text{ м/с}}{0,22 \cdot 10^{-6} \text{ м}} - 4,47 \cdot 1,61 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}\right) \cdot \frac{2}{9,1 \cdot 10^{-31} \text{ кг}}} =$$

$$= 6,4 \cdot 10^5 \text{ м/с}.$$

**Ответ:**  $6,4 \cdot 10^5$  м/с.

2. Электромагнитное излучение с длиной волны  $\lambda = 0,30$  мкм падает на фотоэлемент, находящийся в режиме насыщения. Соответствующая спектральная чувствительность фотоэлемента  $J = 4,8$  мА/Вт. Найти выход фотоэлектронов, т. е. число электронов на каждый падающий фотон.

**Решение.** Спектральная чувствительность фотоэлемента  $J = \frac{I}{\Phi}$ , где  $I = \frac{q}{\Delta t} = \frac{eN_e}{\Delta t}$  – величина фототока ( $N_e$  – количество электронов, участвующих в токе);  $\Phi = \frac{hcN_\phi}{\lambda\Delta t}$  – величина светового потока ( $N_\phi$  – количество фотонов, падающих на поверхность катода).

$$\text{Тогда спектральная чувствительность равна } J = \frac{eN_e}{\Delta t} \cdot \frac{\lambda\Delta t}{hcN_\phi} = \frac{\lambda eN_e}{hcN_\phi}.$$

Выход фотоэлектронов определяется отношением количества фотоэлектронов к количеству фотонов:  $n = \frac{N_e}{N_\phi} = \frac{Jhc}{e\lambda}$ ;

$$n = \frac{4,8 \cdot 10^{-3} \text{ А/Вт} \cdot 6,63 \cdot 10^{-34} \text{ Дж}\cdot\text{с} \cdot 3 \cdot 10^8 \text{ м/с}}{1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Кл} \cdot 0,30 \cdot 10^{-6} \text{ м}} = 0,02.$$

**Ответ:** 0,02.

**3.** Узкий пучок монохроматического рентгеновского излучения падает на рассеивающее вещество. При этом длины волн смещенных составляющих излучения, рассеянного под углами  $\theta_1 = 60^\circ$  и  $\theta_2 = 120^\circ$ , отличаются друг от друга в  $\eta = 2$  раза. Считая, что рассеяние происходит на свободных электронах, найти длину волны падающего излучения.

**Решение.** Запишем формулу Комптона:  $\Delta\lambda = \lambda_c(1 - \cos\theta)$ .

Введем обозначения:  $\lambda_0$  – длина волны падающего излучения,  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$  – длины волн смещенных составляющих излучения.

$$\text{Тогда: } \lambda_1 - \lambda_0 = \lambda_c(1 - \cos\theta_1); \quad (2)$$

$$\lambda_2 - \lambda_0 = \lambda_c(1 - \cos\theta_2). \quad (3)$$

Учитывая, что  $\lambda_2 = \eta\lambda_1$ , уравнение (3) запишем в виде:

$$\eta\lambda_1 - \lambda_0 = \lambda_c(1 - \cos\theta_2).$$

Выразим  $\lambda_1$  из уравнения (2) и подставим в (3):

$$\eta(\lambda_c(1 - \cos\theta_1) + \lambda_0) - \lambda_0 = \lambda_c(1 - \cos\theta_2).$$

$$\text{Тогда для } \lambda_0 \text{ получим } \lambda_0 = \lambda_c \frac{1 - \cos\theta_2 - \eta(1 - \cos\theta_1)}{\eta - 1}.$$

Преобразуем полученное выражение, воспользовавшись тригонометрической формулой половинного аргумента  $\sin^2 \frac{\theta}{2} = \frac{1 - \cos\theta}{2}$ :

$$\lambda_0 = 2\lambda_c \frac{(\sin \frac{\theta_2}{2})^2 - \eta(\sin \frac{\theta_1}{2})^2}{\eta - 1} = 2 \frac{2\pi\hbar}{m_e c} \cdot \frac{(\sin \frac{\theta_2}{2})^2 - \eta(\sin \frac{\theta_1}{2})^2}{\eta - 1};$$

$$\lambda_0 = 2 \cdot \frac{2 \cdot 3,14 \cdot 6,63 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}}{9,1 \cdot 10^{-31} \text{ кг} \cdot 3 \cdot 10^8 \text{ м/с}} \cdot \frac{(\sin 60^\circ)^2 - 2(\sin 30^\circ)^2}{2-1} = 1,2 \cdot 10^{-12} \text{ м} = 1,2 \text{ пм}.$$

**Ответ:** 1,2 пм.

4. Найти длину волны рентгеновского излучения, если максимальная кинетическая энергия комптоновских электронов  $T_{\max} = 0,19 \text{ МэВ}$ .

**Решение.** Введем обозначения:  $\vec{p}_0$  и  $\vec{p}$  – импульс фотона до и после взаимодействия соответственно;  $\lambda_0$  и  $\lambda$  – длина волны фотона до и после взаимодействия соответственно;  $\vec{p}_e$  – импульс электрона после взаимодействия.

Для решения задачи воспользуемся законами сохранения энергии и импульса.

Закон сохранения энергии: (4)

$mc^2 + p_0c = pc + mc^2 + T_{\max}$ , где  $mc^2$  – энергия покоящегося электрона;  $p_0c$  и  $pc$  – энергия фотона до и после взаимодействия соответственно.

С учетом релятивистской связи между импульсом и кинетической энергией закон сохранения примет вид:

$$mc^2 + p_0c = pc + \sqrt{p_e^2 c^2 + m^2 c^4}. \quad (5)$$

Из (4) следует, что  $p_0c - pc = T_{\max}$  или  $\frac{h}{\lambda} = \frac{h}{\lambda_0} - \frac{T_{\max}}{c}$ . (6)

Закон сохранения импульса:  $\vec{p}_0 = \vec{p}_e - \vec{p}$ .

Максимальной кинетической энергией электрон будет обладать при рассеянии фотона «назад», т. е. при угле рассеяния  $180^\circ$ . Изобразим векторы импульсов до и после взаимодействия на рисунке (рис. 4):

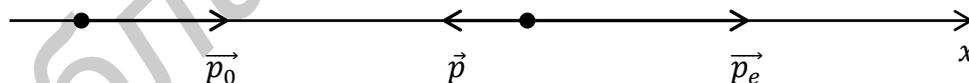


Рис. 4

Как видно из рисунка, закон сохранения импульса в проекции на ось  $x$  примет вид  $p_0 = p_e - p$ .

Выразим импульс электрона:  $p_e = p_0 + p = \frac{h}{\lambda_0} + \frac{h}{\lambda}$ .

Вместо  $\frac{h}{\lambda}$  подставим выражение (6):

$$p_e = \frac{h}{\lambda_0} + \frac{h}{\lambda_0} - \frac{T_{\max}}{c} = \frac{2h}{\lambda_0} - \frac{T_{\max}}{c}. \quad (7)$$

Приравнивая в формулах (4) и (5) левые части, получаем

$$pc + mc^2 + T_{\max} = pc + \sqrt{p_e^2 c^2 + m^2 c^4};$$

$$mc^2 + T_{\max} = \sqrt{p_e^2 c^2 + m^2 c^4}.$$

Последнее уравнение возведем в квадрат и преобразуем полученное выражение:

$$m^2 c^4 + 2m_0 c^2 T_{\max} + T_{\max}^2 = p_e^2 c^2 + m^2 c^4;$$

$$2mc^2 T_{\max} + T_{\max}^2 = p_e^2 c^2.$$

Вместо импульса электрона подставим выражение (7):

$$2mc^2 T_{\max} + T_{\max}^2 = \left( \frac{2h}{\lambda_0} - \frac{T_{\max}}{c} \right)^2 c^2;$$

$$2mc^2 T_{\max} = \frac{4h^2 c^2 - 4hT_{\max} c \lambda_0}{\lambda_0^2};$$

$$2mc^2 T_{\max} \lambda_0^2 + 4hT_{\max} c \lambda_0 - 4h^2 c^2 = 0;$$

$$mcT_{\max} \lambda_0^2 + 2hT_{\max} \lambda_0 - 2h^2 c = 0.$$

Решим полученное квадратное уравнение:

$$D = 4h^2 T_{\max}^2 + 8mc^2 h^2 T_{\max};$$

$$\lambda_0 = \frac{-2hT_{\max} + \sqrt{4h^2 T_{\max}^2 + 8mc^2 h^2 T_{\max}}}{2mcT_{\max}};$$

$$\lambda_0 = \frac{-2hT_{\max} + \sqrt{4h^2 T_{\max}(1 + 2mc^2 T_{\max})}}{2mcT_{\max}};$$

$$\lambda_0 = \frac{-2 \cdot 6,63 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с} \cdot 0,19 \cdot 10^6 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}}{2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ кг} \cdot 3 \cdot 10^8 \text{ м/с} \cdot 0,19 \cdot 10^6 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}} +$$

$$+ \frac{\sqrt{4 \cdot (6,63 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с})^2 \cdot (0,19 \cdot 10^6 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Дж})^2 \cdot ((1 + 2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ кг}) \cdot (3 \cdot 10^8 \frac{\text{м}}{\text{с}})^2 \cdot 0,19 \cdot 10^6 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Дж})}}{2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ кг} \cdot 3 \cdot 10^8 \text{ м/с} \cdot 0,19 \cdot 10^6 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}};$$

$$\lambda_0 = 3,7 \cdot 10^{-12} \text{ м}.$$

**Ответ:** 3,7 пм.

5. Фотон с энергией  $\hbar\omega = 0,15 \text{ МэВ}$  рассеялся на покоившемся свободном электроном, в результате чего его длина волны изменилась на  $\Delta\lambda = 0,3 \text{ пм}$ . Найти угол, под которым вылетел комптоновский электрон.

**Решение.** Воспользуемся законом сохранения импульса:  $\vec{p}_0 = \vec{p}_e + \vec{p}$ .

В проекциях на координатные оси (рис. 5):

$$x: p_0 = p \cos \theta + p_e \cos \varphi;$$

$$y: 0 = p \sin \theta - p_e \sin \varphi.$$

Преобразуем полученные уравнения и выразим  $\text{tg } \varphi$ :

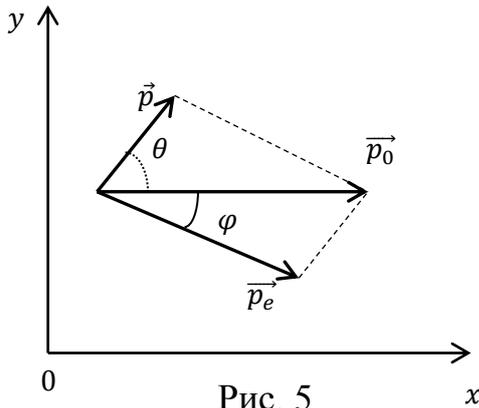


Рис. 5

$$p_0 - p \cos \theta = p_e \cos \varphi; p \sin \theta = p_e \sin \varphi;$$

$$\operatorname{tg} \varphi = \frac{p \sin \theta}{p_0 - p \cos \theta}. \quad (8)$$

Зная начальную энергию фотона  $E_0 = \hbar\omega$ , найдем длину волны фотона до взаимодействия:  $\lambda_0 = \frac{hc}{E_0}$ .

Длина волны фотона после взаимодействия  $\lambda = \lambda_0 + \Delta\lambda$ .

Соответственно импульсы фотона до и после взаимодействия с электроном:

$$p_0 = \frac{h}{\lambda_0} = \frac{E_0}{c} \text{ и}$$

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{\lambda_0 + \Delta\lambda} = \frac{h}{\frac{hc}{E_0} + \Delta\lambda} = \frac{hE_0}{hc + \Delta\lambda E_0}.$$

Угол  $\theta$  найдем из формулы Комптона:

$$\Delta\lambda = \lambda_C(1 - \cos\theta), \text{ откуда } \cos \theta = 1 - \frac{\Delta\lambda mc}{h}.$$

$$\text{Тогда } \sin \theta = \sqrt{1 - (\cos \theta)^2} = \sqrt{\frac{2mc\Delta\lambda}{h} - \frac{(\Delta\lambda mc)^2}{h^2}}.$$

Подставляя полученные выражения в формулу (8) и произведя некоторые упрощения, получим:

$$\operatorname{tg} \varphi = \frac{\sqrt{\frac{2h}{\Delta\lambda mc} - 1}}{1 + \frac{E_0}{mc^2}};$$

$$\operatorname{tg} \varphi = \frac{\sqrt{\frac{2 \cdot 6,63 \cdot 10^{-34} \text{ Дж}\cdot\text{с}}{0,3 \cdot 10^{-12} \text{ м} \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ кг} \cdot 3 \cdot 10^8 \text{ м/с}} - 1}}{1 + \frac{0,15 \cdot 10^6 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}}{9,1 \cdot 10^{-31} (3 \cdot 10^8 \text{ м/с})^2}} = 3,0;$$

$$\varphi = \operatorname{arctg} 3,0 = 71,6^\circ.$$

**Ответ:**  $71,6^\circ$ .

## 2.4. Задачи для самостоятельного решения

1. Определить красную границу фотоэффекта для цинка и максимальную скорость фотоэлектронов, вырываемых с его поверхности электромагнитным излучением с длиной волны 250 нм.

**Ответ:** 332 нм;  $6,6 \cdot 10^5$  м/с.

2. Уединенный шарик радиусом  $R$  освещается светом с длиной волны  $\lambda_1$ . Если шарик дополнительно осветить светом с некоторой длиной волны  $\lambda_2$  ( $\lambda_2 > \lambda_1$ ), то шарик покинет еще  $N$  электронов. Найти длину волны  $\lambda_2$ .

**Ответ:** 
$$\lambda_2 = \frac{\lambda_1}{\frac{Ne^2\lambda_1}{4\pi\epsilon_0hcR} + 1}.$$

3. Для прекращения фотоэффекта, вызванного облучением ультрафиолетовым светом платиновой пластинки, нужно приложить задерживающую разность потенциалов  $U_1 = 3,7$  В. Если платиновую пластинку заменить другой пластинкой, то задерживающую разность потенциалов придется увеличить до 6 В. Определить работу выхода электронов с поверхности этой пластинки.

**Ответ:** 4 эВ.

4. Фототок, возникающий в цепи вакуумного фотоэлемента при освещении цинкового электрода электромагнитным излучением с длиной волны 262 нм, прекращается, если подключить внешнее задерживающее напряжение 1,5 В. Найти величину и полярность внешней контактной разности потенциалов фотоэлемента.

**Ответ:** 0,5 В; ее полярность противоположна полярности внешнего напряжения.

5. Фотон с энергией  $\hbar\omega = 1,00$  МэВ рассеялся на покоившемся свободном электроне. Найти кинетическую энергию электрона отдачи, если в результате рассеяния длина волны фотона изменилась на 25 %.

**Ответ:** 0,20 МэВ.

6. Фотон с длиной волны  $\lambda = 6,0$  пм рассеялся под прямым углом на покоившемся свободном электроне. Найти: а) частоту рассеянного фотона; б) кинетическую энергию электрона отдачи.

**Ответ:** а)  $2,2 \cdot 10^{20}$  с<sup>-1</sup>; б) 60 кэВ.

7. Фотон с импульсом  $p = 1,02$  МэВ/с, где  $c$  – скорость света, рассеялся на покоившемся свободном электроне, в результате чего импульс фотона стал  $p_1 = 0,255$  МэВ/с. Под каким углом рассеялся фотон?

**Ответ:** 120°.

8. Фотон рассеялся под углом  $\theta = 120^\circ$  на покоившемся свободном электро-  
троне, в результате чего электрон получил кинетическую энергию  
 $T = 0,45$  МэВ. Найти энергию фотона до рассеяния.

**Ответ:** 0,68 МэВ.

9. Фотон с энергией, в  $\eta = 2,0$  раза превышающей энергию покоя элект-  
трона, испытал лобовое столкновение с покоившимся свободным электроном.  
Найти радиус кривизны траектории электрона отдачи в магнитном поле  
 $B = 0,12$  Тл. Предполагается, что электрон отдачи движется перпендикулярно  
направлению поля.

**Ответ:** 3,4 см.

### 3. ВОЛНОВЫЕ СВОЙСТВА МИКРОЧАСТИЦ. ГИПОТЕЗА ДЕ БРОЙЛЯ. СООТНОШЕНИЕ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТЕЙ

Недостатки теории Бора показали, что представление об электро-  
не как о механической частице не могло объяснить экспериментальные данные. Требо-  
вались новые взгляды на природу электрона.

Двойственная природа фотонов, открытая к этому времени, позволила в  
1924 г. Л. де Бройлю высказать гипотезу о том, что корпускулярно-волновой  
дуализм можно распространить и на микрочастицы (электроны, протоны, ато-  
мы и т. д.).

То есть частице можно поставить в соответствие волну, частота (длина  
волны) которой равна  $\nu = \frac{E}{h}$  ( $\omega = \frac{E}{\hbar}$  или  $\lambda = \frac{h}{p} = \frac{2\pi\hbar}{p}$ ), названную *волной де  
Бройля*. Таким образом, корпускулярно-волновой дуализм присущ всем видам  
материи.

В 1927 г. это предположение впервые нашло экспериментальное под-  
тверждение в опытах К. Дэвиссона и Л. Джермера по дифракции электронов на  
кристаллах никеля.

Общепринятая интерпретация волн де Бройля была дана М. Борном в  
1926 г., выдвинувшем идею о том, что волновым законам подчиняется величина,  
описывающая состояние частицы – волновая функция ( $\Psi$ -функция), квадрат  
которой определяет вероятность обнаружить частицу в различных точках в раз-  
личные моменты времени. Волновая функция свободной частицы с точно за-  
данным импульсом и является волной де Бройля.

То есть волны де Бройля – не какие-либо физические материальные волны, а *волны вероятности*.

Согласно двойственной корпускулярно-волновой природе частиц вещества для описания микрочастиц используют то волновые, то корпускулярные представления. Поэтому приписывать им *все* свойства частиц и *все* свойства волн нельзя. Например, в классической механике любая частица движется по определенной траектории так, что в каждый момент времени четко фиксированы ее координата и импульс. В квантовой механике говорить о движении частицы по определенной траектории нельзя. И хотя к атомному объекту одинаково применимы понятия «частица» и «волна», однако определить их строго можно только порознь. К таким мыслям пришел в 1927 г. В. Гейзенберг.

*Нельзя одновременно точно определить координату и импульс микрообъекта:*

$$\begin{cases} \Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \\ \Delta y \cdot \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2} \\ \Delta z \cdot \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2} \end{cases} - \text{соотношение неопределенностей.}$$

*Неопределенность физической величины – среднее квадратическое отклонение от среднего значения:  $\Delta A = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}$ .*

То есть нельзя одновременно точно определить положение микрообъекта и его длину волны.

Соотношение неопределенностей – строгий закон природы, который никак не связан с несовершенством измерительных приборов.

Если рассматривать соотношение неопределенностей в виде  $\Delta x \cdot \Delta \vartheta_x \geq \frac{\hbar}{2m}$ , то видим, что чем больше масса частицы, тем меньше произведение  $\Delta x \cdot \Delta \vartheta_x$ , т. е. тем с большей точностью можно применить к такой частице понятие траектории. Таким образом, для макрочастиц волновые свойства не играют никакой роли.

### 3.1. Примеры решения задач

1. Какую энергию необходимо дополнительно сообщить электрону, чтобы его дебройлевская длина волны уменьшилась от 100 до 50 пм?

**Решение.** Энергия релятивистского электрона равна  $E_e = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}$ .

Учитывая, что  $\lambda_B = \frac{h}{p}$  – длина волны де Бройля для электрона, получим

$$\Delta E = \sqrt{\frac{h^2 c^2}{\lambda_2^2} + m^2 c^4} - \sqrt{\frac{h^2 c^2}{\lambda_1^2} + m^2 c^4};$$

$$\Delta E = \sqrt{\frac{(6,63 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с})^2 (3 \cdot 10^8 \text{ м/с})^2}{(50 \cdot 10^{-12} \text{ м})^2} + (9,1 \cdot 10^{-31} \text{ кг})^2 (3 \cdot 10^8 \text{ м/с})^4} - \sqrt{\frac{(6,63 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с})^2 (3 \cdot 10^8 \text{ м/с})^2}{(100 \cdot 10^{-12} \text{ м})^2} + (9,1 \cdot 10^{-31} \text{ кг})^2 (3 \cdot 10^8 \text{ м/с})^4} = 7,3 \cdot 10^{-14} \text{ Дж}.$$

**Ответ:**  $\Delta E = 7,3 \cdot 10^{-14} \text{ Дж} = 0,45 \text{ кэВ}$ .

2. Какую разность потенциалов должен пройти электрон, чтобы его дебройлевская длина волны была равна его комптоновской длине волны?

**Решение.** Работа электрического поля численно равна кинетической энергии, приобретенной электроном при прохождении ускоряющей разности потенциалов:  $eU = T$ .

Кинетическую энергию релятивистского электрона найдем из условия  $mc^2 + T = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}$ .

Преобразуем предыдущее выражение и решим получившееся квадратное уравнение относительно  $T$ :

$$T^2 + 2mc^2 T - p^2 c^2 = 0;$$

$$D = 4m^2 c^4 + 4p^2 c^2;$$

$$T = \frac{-2mc^2 + 2c\sqrt{m^2 c^2 + p^2}}{2} = c(\sqrt{m^2 c^2 + p^2} - mc)$$

Комптоновская длина волны электрона  $\lambda_C = \frac{2\pi\hbar}{mc}$ , дебройлевская длина волны –  $\lambda_B = \frac{h}{p}$ .

Учитывая, что  $\frac{2\pi\hbar}{mc} = \frac{h}{p}$ , импульс такого электрона равен  $p = mc$ .

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

$$\text{Значит, } U = \frac{T}{e} = \frac{mc^2(\sqrt{2}-1)}{e};$$

$$U = \frac{9,1 \cdot 10^{-31} \text{ кг} \cdot (3 \cdot 10^8 \text{ м/с})^2 (\sqrt{2}-1)}{1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Кл}} = 0,21 \cdot 10^6 \text{ В}.$$

**Ответ:** 0,21 МВ.

3. Параллельный пучок моноэнергетических электронов падает нормально на диафрагму с узкой прямоугольной щелью шириной  $b = 1,0$  мкм. Определить скорость этих электронов, если на экране, отстоящем от щели на расстоянии  $l = 50$  см, ширина центрального дифракционного максимума  $\Delta x = 0,36$  мкм.

**Решение.** Вследствие дифракции с наибольшей вероятностью электрон будет двигаться в пределах угла  $2\varphi$ , где  $\varphi$  – угол, соответствующий первому дифракционному минимуму (рис. 6).

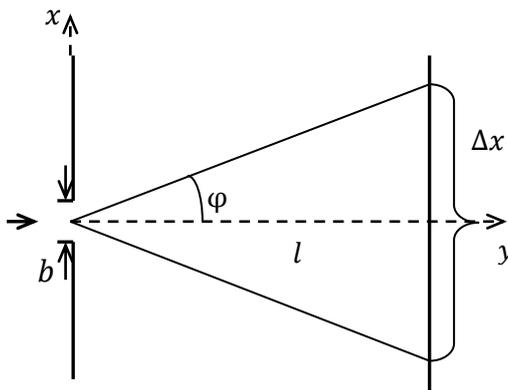


Рис. 6

Он определяется условием  $b\sin\varphi = \lambda$ , где  $\lambda = \lambda_B$  – дебройлевская длина волны электрона.

В пределах малых углов  $\sin\varphi = \text{tg}\varphi = \frac{\Delta x}{2l}$ .

$$\text{Тогда } \frac{b\Delta x}{2l} = \lambda_B; \quad \frac{b\Delta x}{2l} = \frac{h}{m\vartheta}.$$

$$\text{Откуда } \vartheta = \frac{2lh}{bm\Delta x};$$

$$\vartheta = \frac{2 \cdot 0,5 \text{ м} \cdot 6,63 \cdot 10^{-34} \text{ Дж}\cdot\text{с}}{1,0 \cdot 10^{-6} \text{ м} \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ кг} \cdot 0,36 \cdot 10^{-6} \text{ м}} = 2,0 \cdot 10^6 \text{ м/с}.$$

**Ответ:**  $2,0 \cdot 10^6$  м/с.

4. Оценить неопределенность скорости частицы, неопределенность координаты которой  $\Delta x = \frac{\lambda}{2\pi}$ , где  $\lambda$  – ее дебройлевская длина волны.

**Решение.** При решении задачи будем считать, что  $\Delta x \cdot \Delta p_x \approx \hbar$ .

Запишем соотношение неопределенностей в виде  $\Delta x \cdot \Delta \vartheta_x \approx \frac{\hbar}{m}$ . Тогда

$$\frac{\lambda}{2\pi} \cdot \Delta \vartheta_x \geq \frac{\hbar}{m}.$$

Учитывая, что  $\lambda_B = \frac{h}{m\vartheta_x}$ , получим  $\frac{\hbar}{m\vartheta_x} \cdot \Delta \vartheta_x \geq \frac{\hbar}{m}$ . Откуда  $\Delta \vartheta_x \geq \vartheta_x$  или

$$\Delta \vartheta_x \sim \vartheta_x.$$

**Ответ:**  $\Delta \vartheta_x \sim \vartheta_x$ .

5. Электрон с кинетической энергией  $T \approx 4$  эВ локализован в области размером  $l = 1$  мкм. Оценить с помощью соотношения неопределенностей относительную неопределенность его скорости.

**Решение.** Запишем соотношение неопределенностей:  $\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar$  или  $\Delta x \cdot m\Delta v_x \geq \hbar$ .

Учитывая, что  $\Delta x \leq l$ , получим  $lm\Delta v_x \sim \hbar$ , откуда  $\Delta v_x \sim \frac{\hbar}{lm}$ .

Скорость электрона с кинетической энергией  $T$  равна:  $v_x = \sqrt{\frac{2T}{m}}$ .

$$\text{Тогда } \frac{\Delta v_x}{v_x} \sim \frac{\hbar}{lm} \sqrt{\frac{m}{2T}} = \frac{\hbar}{l\sqrt{2mT}};$$

$$\frac{\Delta v_x}{v_x} \sim \frac{6,63 \cdot 10^{-34} \text{ Дж}\cdot\text{с}}{1 \cdot 10^{-6} \text{ м} \sqrt{2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ кг} \cdot 4 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}}} = 1 \cdot 10^{-4}.$$

**Ответ:**  $1 \cdot 10^{-4}$ .

### 3.2. Задачи для самостоятельного решения

1. Найти дебройлевскую длину волны молекул водорода, находящихся в термодинамическом равновесии при комнатной температуре.

**Ответ:**  $1,03 \cdot 10^{-10}$  м.

2. Найти дебройлевскую длину волны камня массой 20 г, упавшего с высоты 15 м.

**Ответ:**  $19,1 \cdot 10^{-34}$  м.

3. Во сколько раз отличаются дебройлевская длина волны электрона, прошедшего разность потенциалов в 1 В, и дебройлевская длина волны электрона, прошедшего разность потенциалов в 1 кВ?

**Ответ:** 31,6.

4. Параллельный поток электронов, ускоренных разностью потенциалов  $U = 25$  В, падает нормально на диафрагму с двумя узкими щелями, расстояние между которыми  $d = 50$  мкм. Определить расстояние между соседними максимумами дифракционной картины на экране, расположенном на расстоянии  $l = 100$  см от щелей.

**Ответ:** 4,9 мкм.

5. Предполагая, что неопределенность координаты движущейся частицы равна дебройлевской длине волны, определить относительную неопределенность  $\Delta p/p$  импульса этой частицы.

Ответ: 0,159.

6. Во сколько раз дебройлевская длина волны  $\lambda$  частицы меньше неопределенности  $\Delta x$  ее координаты, которая соответствует относительной неопределенности импульса в 1 %?

Ответ: 15,9.

7. Приняв, что минимальная энергия  $E$  нуклона в ядре 10 МэВ, оценить, исходя из соотношения неопределенностей, линейные размеры ядра.

Ответ: 3 фм.

#### 4. УРАВНЕНИЕ ШРЁДИНГЕРА. СМЫСЛ $\Psi$ -ФУНКЦИИ. ЧАСТИЦА В ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЯМЕ

Началом волновой механики стали идеи де Бройля о волновых свойствах частиц. Основным уравнением нерелятивистской квантовой механики является уравнение Шрёдингера. Оно не может быть выведено из других соотношений. Его следует рассматривать как исходное предположение, справедливость которого доказывается тем, что все вытекающие из него следствия самым точным образом согласуются с опытными фактами. Было получено Э. Шрёдингером в 1926 г.

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

где  $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U$  – оператор энергии  $E$  (оператор Гамильтона);  $m$  – масса частицы;  $U(x, y, z, t)$  – функция, градиент которой, взятый с обратным знаком, определяет силу, действующую на частицу;  $\Delta$  – оператор Лапласа;  $\Psi(x, y, z, t)$  – волновая функция частицы, являющаяся решением уравнения Шрёдингера.

В декартовой системе координат оператор Лапласа имеет вид

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}.$$

Волновая функция ( $\Psi$ -функция) характеризует состояние микрочастицы. Вид  $\Psi$ -функции определяется функцией  $U$ , т. е. характером сил, действующих на частицу.

Если силовое поле, в котором движется частица, стационарно, то функция  $U$  не зависит явно от времени и имеет смысл потенциальной энергии. В этом случае состояние частицы описывается *стационарным* уравнением Шрёдингера:  $\hat{H}\psi = E\psi$  или  $-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi = (E - U)\psi$ , где  $E$  – полная энергия частицы;  $\psi(x, y, z)$  – координатная часть волновой функции.

Согласно Борну, квадрат модуля  $\Psi$ -функции определяет вероятность  $dP$  того, что частица будет обнаружена в пределах объема  $dV$ :

$dP = A|\Psi|^2 dV = A\Psi\Psi^* dV$ , где  $A$  – коэффициент пропорциональности.

Интеграл от данного выражения, взятый по всему объему, должен равняться единице:  $\int dP = A \int \Psi\Psi^* dV = 1$ .

Действительно, этот интеграл дает вероятность того, что частица находится в одной из точек пространства, т. е. вероятность достоверного события, которая равна единице.

В квантовой механике принимается, что  $\Psi$ -функция допускает умножение на отличное от нуля произвольное комплексное число  $C$ , причем  $\Psi$  и  $C\Psi$  описывают одно и то же состояние частицы. Это обстоятельство позволяет выбрать  $\Psi$ -функцию так, чтобы она удовлетворяла условию  $\int \Psi\Psi^* dV = 1$ .

Это выражение носит название *условия нормировки*. Функции, удовлетворяющие этому условию, называются *нормированными*. Для нормированной функции  $dP = \Psi\Psi^* dV = |\Psi|^2 dV$ . При этом  $\Psi\Psi^* = \psi\psi^*$ .

Для  $\Psi$ -функций справедлив принцип суперпозиции состояний: если система может находиться в различных состояниях с волновой функцией  $\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_n$ , то возможно и состояние с волновой функцией, равной сумме (и вообще любой линейной комбинации) этих волновых функций:

$\Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2 + \dots + c_n\Psi_n$ , где  $c_1, c_2, \dots, c_n$  – произвольные комплексные числа.

Из принципа суперпозиции следует, что любая волновая функция может быть разложена в сумму собственных функций оператора любой физической величины  $\sum \Psi = c_n\Psi_n$ ; при этом квадраты модулей коэффициентов в разложении имеют смысл вероятностей обнаружить на опыте соответствующие значения этой величины. Для нормированных функций  $\sum |c_n|^2 = 1$ . Сложение волновых функций (амплитуд вероятностей), а не вероятностей (квадратов волновых функций) принципиально отличает квантовую теорию от любой классической статистической теории, в которой справедлива теорема сложения вероятностей.

Уравнение Шрёдингера позволяет найти  $\psi$ -функцию данного состояния и, следовательно, определить вероятность нахождения частицы в данной точке пространства. Однако этим далеко не исчерпывается значение указанного уравнения. Из уравнения  $\hat{H}\psi = E\psi$  и условий, налагаемых на  $\psi$ -функцию, непосредственно вытекают правила квантования энергии.

В соответствии со своим смыслом  $\psi$ -функция должна быть однозначной, непрерывной и конечной. Кроме того, она должна иметь непрерывную и конечную производную. Совокупность перечисленных требований носит название *стандартных условий*.

В уравнение Шрёдингера входит в качестве параметра полная энергия частицы  $E$ . Уравнения вида  $\hat{H}\psi = E\psi$  имеют решения, удовлетворяющие стандартным условиям, не при любых значениях энергии  $E$ , а лишь при некоторых избранных значениях. Эти избранные значения называют *собственными значениями* соответствующей величины (энергии). Решения, соответствующие собственным значениям  $E$ , называются *собственными функциями* задачи.

Совокупность собственных значений называется *спектром* величины. Если эта совокупность образует дискретную последовательность, то спектр называется *дискретным*. Если эта совокупность образует непрерывную последовательность, то спектр называется *непрерывным* или *сплошным*.

В случае дискретного спектра собственные значения и собственные функции можно пронумеровать:

$$E_1, E_2, \dots, E_n, \dots$$

$$\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n, \dots$$

Таким образом, из основных положений квантовой механики без каких-либо дополнительных предположений получается *квантование энергии*.

#### 4.1. Примеры решения задач

При решении задач будем пользоваться *формулами Эйлера*, которые связывают комплексную экспоненту с тригонометрическими функциями:

$$e^{iz} = \cos z + i \sin z;$$

$$e^{-iz} = \cos z - i \sin z.$$

Во всех задачах на нахождение частицы (квантового объекта) в заданном потенциальном поле (потенциальной «яме») используется одинаковый подход к решению. Во-первых, составляется уравнение Шрёдингера для стационарных

состояний для каждой области, в которой исследуется поведение частицы, во-вторых, находится вид решения этого дифференциального уравнения, в-третьих, используя естественные условия, накладываемые на  $\psi$ -функцию, которая является решением уравнения Шрёдингера, находят все неизвестные постоянные.

Поэтому при решении задач вышеуказанного типа будем следовать определенному алгоритму, который рассмотрим на примере.

**1.** Частица находится в основном состоянии в одномерной прямоугольной потенциальной яме шириной  $l$  с абсолютно непроницаемыми стенками ( $0 < x < l$ ). Найти вероятность пребывания частицы в области  $0 < x < \frac{l}{3}$ ;  $\frac{l}{3} < x < \frac{2l}{3}$ ;  $\frac{2l}{3} < x < l$ .

**Решение:**

- запишем стационарное уравнение Шрёдингера в общем виде:  
 $\hat{H}\psi = E\psi$ ;

- применим уравнение Шрёдингера для области, в которой исследуется поведение частицы (в данном случае для потенциальной ямы).

Потенциальная энергия частицы внутри ямы равна нулю:  $U(x) = 0$ , поэтому  $-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi = E\psi$  или  $\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + E\psi = 0$ ;

- приведем полученное уравнение к каноническому виду:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0;$$

- введем обозначение:  $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ , где  $k$  – волновое число (может принимать любые положительные значения).

Тогда уравнение Шрёдингера примет вид  $\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + k^2\psi = 0$ ;

- запишем характеристическое уравнение  $\lambda^2 + k^2 = 0$  и найдем его корни:

$$\lambda^2 = -k^2, \text{ тогда } \lambda_1 = ik; \lambda_2 = -ik;$$

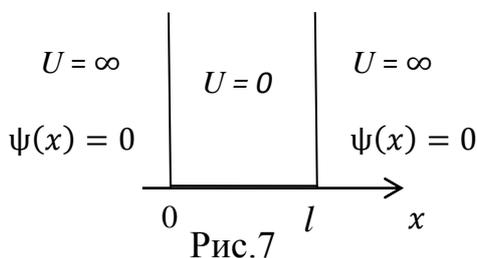
- запишем волновую функцию в неявном виде и подставим корни характеристического уравнения:

$$\psi = Ae^{\lambda_1 x} + Be^{\lambda_2 x} = Ae^{ikx} + Be^{-ikx};$$

- используем формулы Эйлера  $e^{iz} = \cos z + i \sin z$  и  $e^{-iz} = \cos z - i \sin z$  для волновой функции в неявном виде. Преобразуем полученное выражение:

$$\begin{aligned} \psi &= A(\cos kx + i \sin kx) + B(\cos kx - i \sin kx) = \\ &= (A + B) \cos kx + (A - B)i \sin kx; \end{aligned}$$

- используя граничные условия, найдем значения  $k$  и  $E$ .



Одним из условий, накладываемых на  $\psi$ -функцию, является условие непрерывности, поэтому  $\psi(0) = \psi(l) = 0$ , т. к.  $\psi(x) = 0$  при  $x < 0$  и  $x > l$  (частица находится в потенциальной яме, т. е. за ее пределами частицы точно нет (рис. 7)).

$$\text{Тогда } \begin{cases} \psi(0) = (A + B) \cos(k \cdot 0) + (A - B)i \sin(k \cdot 0) = A + B = 0, \\ \psi(l) = (A + B) \cos(kl) + (A - B)i \sin(kl) = (A - B)i \sin(kl) = 0. \end{cases}$$

Из первого уравнения следует, что  $A = -B$ .

Из второго уравнения получаем, поскольку  $(A - B)i \neq 0$ , то  $\sin(kl) = 0$ , значит  $kl = \pi n$ , тогда  $k = \frac{\pi n}{l}$ , где  $n$  называется квантовым числом.

Учитывая, что  $k^2 = \frac{\pi^2 n^2}{l^2} = \frac{2mE}{\hbar^2}$ , получаем  $E = \frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{2ml^2}$  – собственные значения энергии частицы.

Тогда волновую функцию можно представить в виде  $\psi = 2iA \sin\left(\frac{\pi n}{l} x\right)$ ;

- воспользовавшись условием нормировки  $\psi$ -функции, найдем коэффициент  $A$ .

Волновая функция должна быть однозначной, т. е. удовлетворять следующему уравнению (условие нормировки):  $P = \int_0^l |\psi|^2 dx$ , где  $P$  – вероятность нахождения частицы в заданной области пространства. В нашем случае частица точно находится в объеме  $0 < x < l$ , поэтому вероятность ее пребывания в потенциальной яме равна единице.

Подставим выражение  $\psi = 2iA \sin\left(\frac{\pi n}{l} x\right)$  в условие нормировки и решим полученное уравнение:

$$\begin{aligned}
 1 &= \int_0^l 4i^2 A^2 \sin^2\left(\frac{\pi n}{l} x\right) dx = 4i^2 A^2 \cdot \frac{l}{\pi n} \int_0^l \sin^2\left(\frac{\pi n}{l} x\right) d\left(\frac{\pi n}{l} x\right) = \\
 &= \frac{4i^2 A^2 l}{\pi n} \int_0^l \frac{1 - \cos\left(\frac{2\pi n}{l} x\right)}{2 \cdot 2} d\left(\frac{2\pi n}{l} x\right) = \frac{2i^2 A^2 l}{2\pi n} \left(\frac{2\pi n}{l} x - \sin\left(\frac{2\pi n}{l} x\right)\right) \Bigg|_0^l = \\
 &= \frac{i^2 A^2 l}{\pi n} \cdot \frac{2\pi n}{l} \cdot l = 2i^2 A^2 l; \\
 2i^2 A^2 l &= 1, \text{ тогда } A = \frac{1}{i\sqrt{2l}};
 \end{aligned}$$

- запишем выражение для  $\psi$ -функции в явном виде (с учетом найденных коэффициентов):

$$\psi(x) = 2i \cdot \frac{1}{i\sqrt{2l}} \cdot \sin\left(\frac{\pi n}{l} x\right) = \sqrt{\frac{2}{l}} \left(\frac{\pi n}{l} x\right), \text{ где } n = 1, 2, 3 \dots$$

Графики волновой функции  $\psi(x)$  для квантовых чисел  $n = 1$  и  $n = 2$  (рис. 8, 9):

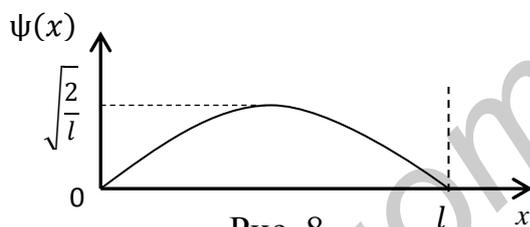


Рис. 8

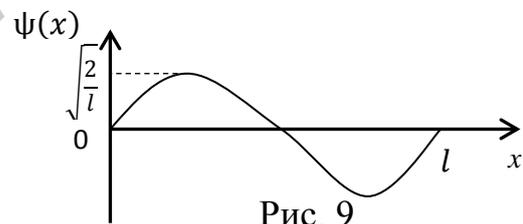


Рис. 9

Воспользовавшись явным видом  $\psi$ -функции, определим вероятность нахождения частицы в заданных областях в пределах потенциальной ямы.

Для основного состояния  $n = 1$ .

$$\begin{aligned}
 P\left(0 < x < \frac{l}{3}\right) &= \int_0^{l/3} \frac{2}{l} \sin^2\left(\frac{\pi n}{l} x\right) dx = \int_0^{l/3} \frac{2}{l} \cdot \frac{1 - \cos\left(\frac{2\pi n}{l} x\right)}{2} d\left(\frac{2\pi n}{l} x\right) \frac{l}{2\pi n} = \\
 &= \frac{1}{2\pi n} \left(\frac{2\pi n}{l} x - \sin\left(\frac{2\pi n}{l} x\right)\right) \Bigg|_0^{l/3} = \frac{1}{2\pi n} \left(\frac{2\pi n}{3} - \sin\frac{2\pi n}{3}\right) = \frac{1}{3} - \frac{\sqrt{3}}{2} \cdot \frac{1}{2\pi} = \\
 &= \frac{1}{3} - \frac{\sqrt{3}}{4\pi} = 0,33 - 0,14 \approx 0,195 \text{ или } P \approx 19,5 \%.
 \end{aligned}$$

$$P\left(\frac{l}{3} < x < \frac{2l}{3}\right) = \int_{l/3}^{2l/3} \frac{2}{l} \sin^2\left(\frac{\pi n}{l} x\right) dx = \frac{1}{2\pi n} \left(\frac{2\pi n}{l} x - \sin\left(\frac{2\pi n}{l} x\right)\right) \Bigg|_{l/3}^{2l/3} =$$

$$= \frac{1}{2\pi n} \left( \frac{4\pi n}{3} - \frac{2\pi n}{3} - \sin \frac{4\pi n}{3} + \sin \frac{2\pi n}{3} \right) = \frac{1}{2\pi} \left( \frac{2\pi}{3} + \frac{\sqrt{3}}{2} + \frac{\sqrt{3}}{2} \right) = \frac{1}{3} + \frac{\sqrt{3}}{2\pi} =$$

$$= 0,33 + 0,28 \approx 0,61 \text{ или } P \approx 61 \%.$$

$$P \left( \frac{2l}{3} < x < l \right) = \int_{2l/3}^l \frac{2}{l} \sin^2 \left( \frac{\pi n}{l} x \right) dx = \frac{1}{2\pi n} \left( \frac{2\pi n}{l} x - \sin \left( \frac{2\pi n}{l} x \right) \right) \Bigg|_{2l/3}^l =$$

$$= \frac{1}{2\pi} \left( 2\pi - \frac{4\pi}{3} + \sin \frac{4\pi}{3} \right) = \frac{1}{3} - \frac{\sqrt{3}}{4\pi} = 0,33 - 0,14 \approx 0,195 \text{ или } P \approx 19,5 \%.$$

**Ответ:**  $P \left( 0 < x < \frac{l}{3} \right) \approx 19,5$ ;  $P \left( \frac{l}{3} < x < \frac{2l}{3} \right) \approx 61 \%$ ;  $P \left( \frac{2l}{3} < x < l \right) \approx 19,5 \%$ .

2. Частица массой  $m$  находится в трехмерной потенциальной яме с абсолютно непроницаемыми стенками. Стороны ямы  $a, b, c$ . Найти:

- собственные значения энергии частицы;
- разность энергий 3-го и 4-го уровней для кубической ямы со стороной куба  $a$ ;
- энергию 6-го уровня и соответствующее ему число состояний (кратность вырождения) частицы в кубической потенциальной яме.

**Решение:**

а) для нахождения собственных значений энергии частицы запишем стационарное уравнение Шрёдингера в общем виде:  $\hat{H}\psi = E\psi$ .

Применим уравнение Шрёдингера для потенциальной ямы. Так как потенциальная энергия частицы внутри ямы равна нулю  $U(x) = 0$ , то  $-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi = E\psi$  или  $\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + E\psi = 0$ .

Учитывая принцип суперпозиции квантовых состояний, приведем полученное уравнение к каноническому виду:

$$\Delta\psi_x\psi_y\psi_z + \frac{2m}{\hbar^2} (E_x + E_y + E_z)\psi_x\psi_y\psi_z = 0 \text{ или}$$

$$\frac{\partial^2\psi_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi_y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi_z}{\partial z^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E_x + E_y + E_z)\psi_x\psi_y\psi_z = 0.$$

Введем волновое число  $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ , тогда уравнение Шрёдингера примет вид

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 \psi_x}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E_x \psi_x = 0, \\ \frac{\partial^2 \psi_y}{\partial y^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E_y \psi_y = 0, \\ \frac{\partial^2 \psi_z}{\partial z^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E_z \psi_z = 0. \end{cases}$$

Получим  $\begin{cases} k_x^2 = \frac{2mE_x}{\hbar^2}, \\ k_y^2 = \frac{2mE_y}{\hbar^2}, \\ k_z^2 = \frac{2mE_z}{\hbar^2}, \end{cases}$  тогда  $k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$ .

Запишем характеристическое уравнение и найдем его корни:

$$\begin{cases} \lambda_x^2 + k_x^2 = 0; \lambda_x^2 = -k_x^2; \lambda_{x_1} = ik_x; \lambda_{x_2} = -ik_x, \\ \lambda_y^2 + k_y^2 = 0; \lambda_y^2 = -k_y^2; \lambda_{y_1} = ik_y; \lambda_{y_2} = -ik_y, \\ \lambda_z^2 + k_z^2 = 0; \lambda_z^2 = -k_z^2; \lambda_{z_1} = ik_z; \lambda_{z_2} = -ik_z. \end{cases}$$

Запишем волновую функцию в неявном виде (с учетом корней характеристического уравнения и формул Эйлера):

$$\begin{cases} \psi_x = Ae^{ik_x x} + Be^{-ik_x x} = (A+B) \cos(k_x x) + (A-B)i \sin(k_x x), \\ \psi_y = Ce^{ik_y y} + De^{-ik_y y} = (C+D) \cos(k_y y) + (C-D)i \sin(k_y y), \\ \psi_z = Me^{ik_z z} + Ne^{-ik_z z} = (M+N) \cos(k_z z) + (M-N)i \sin(k_z z). \end{cases}$$

Используя граничные условия, найдем значения волнового числа  $k$  и собственные значения энергии частицы  $E$ .

Учитывая, что  $\psi_x(0) = \psi_y(0) = \psi_z(0) = 0$ ;  $\psi_x(a) = \psi_y(b) = \psi_z(c) = 0$ , получим:

$$\begin{cases} \psi_x(0) = (A+B) \cos(k_x \cdot 0) + (A-B)i \sin(k_x \cdot 0) = A+B = 0 \Rightarrow A = -B, \\ \psi_y(0) = (C+D) \cos(k_y \cdot 0) + (C-D)i \sin(k_y \cdot 0) = C+D = 0 \Rightarrow C = -D, \\ \psi_z(0) = (M+N) \cos(k_z \cdot 0) + (M-N)i \sin(k_z \cdot 0) = N+M = 0 \Rightarrow N = -M; \end{cases}$$

$$\begin{cases} \psi_x = 2Ai \sin(k_x x), & \begin{cases} \psi_x(a) = 2Ai \sin(k_x a) = 0, \\ \psi_y = 2Ci \sin(k_y y), & \begin{cases} \psi_y(b) = 2Ci \sin(k_y b) = 0, \\ \psi_z = 2Mi \sin(k_z z); & \begin{cases} \psi_z(c) = 2Mi \sin(k_z c) = 0; \end{cases} \end{cases} \end{cases} \end{cases}$$

$$\begin{cases} k_x a = \pi n_1, \\ k_y b = \pi n_2, \\ k_z c = \pi n_3; \end{cases} \begin{cases} k_x^2 = \frac{2mE_x}{\hbar^2} = \frac{\pi^2 n_1^2}{a^2}, \\ k_y^2 = \frac{2mE_y}{\hbar^2} = \frac{\pi^2 n_2^2}{b^2}, \\ k_z^2 = \frac{2mE_z}{\hbar^2} = \frac{\pi^2 n_3^2}{c^2}; \end{cases} \begin{cases} E_x = \frac{\hbar^2 \pi^2 n_1^2}{2ma^2}, \\ E_y = \frac{\hbar^2 \pi^2 n_2^2}{2mb^2}, \\ E_z = \frac{\hbar^2 \pi^2 n_3^2}{2mc^2}. \end{cases}$$

Таким образом, учитывая принцип суперпозиции квантовых состояний, получим

$$E = E_x + E_y + E_z = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left( \frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} + \frac{n_3^2}{c^2} \right), \text{ где } n_1, n_2, n_3 - \text{квантовые числа.}$$

Если яма кубическая с шириной  $a$ , то  $E = \frac{\hbar^2 \pi^2 (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)}{2ma^2}$ ;

б), в) для того чтобы найти разность энергий 3-го и 4-го уровней и энергию 6-го уровня и соответствующее ему число состояний (кратность вырождения), составим таблицу (табл. 1):

Таблица 1

Номер энергетического состояния (энергетический уровень)	$n_1$	$n_2$	$n_3$	$\sum n_i^2$	Кратность вырождения
1	1	1	1	3	1
2	1	1	2	6	3
	2	1	1		
3	1	2	2	9	3
	2	2	1		
4	1	1	3	11	3
	3	1	1		
5	2	2	2	12	1
6	1	2	3	14	6
	2	3	1		
	3	1	2		
	3	2	1		
	2	1	3		
	1	3	2		

Тогда разность энергий 3-го и 4-го уровней

$$\Delta E = E_4 - E_3 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} (11 - 9) = \frac{\hbar^2 \pi^2}{ma^2}.$$

Энергия 6-го уровня  $E_6 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left( \frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} + \frac{n_3^2}{c^2} \right)$ .

Для кубической ямы с шириной  $a$  энергия 6-го уровня  $E_6 = \frac{14\hbar^2\pi^2}{2ma^2} = \frac{7\hbar^2\pi^2}{ma^2}$ . Кратность вырождения при этом равна 6 (количеству перестановок тройки чисел 1, 2, 3).

**Ответ:** а)  $E = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m} \left( \frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} + \frac{n_3^2}{c^2} \right)$ ; б)  $\Delta E = \frac{\hbar^2\pi^2}{ma^2}$ ; в)  $E_6 = \frac{7\hbar^2\pi^2}{ma^2}$ ; кратность вырождения равна 6.

**3.** Найти возможные значения энергии частицы массой  $m$ , находящейся в сферически-симметричной потенциальной яме  $U(r) = 0$  при  $r < r_0$  и  $U(r) = \infty$ , для случая, когда движение частицы описывается волновой функцией  $\psi(r)$ , зависящей только от  $r$ .

Указание. При решении уравнения Шрёдингера воспользоваться подстановкой  $\psi(r) = \frac{\chi(r)}{r}$ .

**Решение.** Запишем стационарное уравнение Шрёдингера в общем виде:  $\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi = 0$  (для области  $r < r_0$ , где  $U(r) = 0$ ).

Так как частица находится в сферически-симметричной потенциальной яме, будем использовать оператор Лапласа в сферических координатах:

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

По условию задачи  $\psi(r)$  зависит только от радиуса  $r$  и не зависит от угловых координат  $\theta$  и  $\varphi$ . Поэтому будем использовать только радиальную составляющую оператора Лапласа:  $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r}$ .

$$\text{Уравнение Шрёдингера примет вид } \frac{\partial^2\psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \cdot \frac{\partial\psi}{\partial r} + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi = 0.$$

$$\text{Введем обозначение } k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \text{ тогда } \frac{\partial^2\psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \cdot \frac{\partial\psi}{\partial r} + k^2\psi = 0.$$

$$\text{Воспользуемся подстановкой } \psi(r) = \frac{\chi(r)}{r}. \text{ Тогда } \frac{\partial\psi}{\partial r} = \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial\chi}{\partial r} - \frac{1}{r^2}\chi \text{ и}$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial r^2} = -\frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial\chi}{\partial r} + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial^2\chi}{\partial r^2} + \frac{2}{r^3} \cdot \chi - \frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial\chi}{\partial r} = \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial^2\chi}{\partial r^2} - \frac{2}{r^2} \cdot \frac{\partial\chi}{\partial r} + \frac{2}{r^3} \cdot \chi.$$

Уравнение Шрёдингера примет вид

$$\frac{1}{r} \cdot \frac{\partial^2\chi}{\partial r^2} - \frac{2}{r^2} \cdot \frac{\partial\chi}{\partial r} + \frac{2}{r^3} \cdot \chi + \frac{2}{r} \left( \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial\chi}{\partial r} - \frac{1}{r^2}\chi \right) + k^2 \frac{\chi}{r} = 0.$$

Упростим выражение:

$$\frac{\partial^2\chi}{\partial r^2} + k^2\chi = 0. \tag{9}$$

Запишем характеристическое уравнение  $\lambda^2 + k^2 = 0$  и найдем его корни  $\lambda^2 = -k^2$ , тогда  $\lambda_1 = ik; \lambda_2 = -ik$ .

Решением уравнения (9) является

$$\chi = Ae^{\lambda_1 r} + Be^{\lambda_2 r} = Ae^{ikr} + Be^{-ikr}.$$

Воспользуемся формулами Эйлера:

$$\begin{aligned} \chi &= A(\cos kx + i \sin kx) + B(\cos kx - i \sin kx) = \\ &= (A + B) \cos kx + (A - B)i \sin kx. \end{aligned}$$

Используем граничные условия:  $\psi(r_0) = \psi(0) = 0$ , тогда  $\chi(0) = \psi(0) \cdot r = 0$  и  $\chi(r_0) = \psi(r_0) \cdot r = 0$ .

$$\chi(0) = (A + B) \cos(k \cdot 0) + (A - B)i \sin(k \cdot 0) = A + B = 0,$$

$$\chi(r_0) = (A + B) \cos(kr_0) + (A - B)i \sin(kr_0) = (A - B)i \sin(kr_0) = 0.$$

Из первого уравнения следует, что  $A = -B$ .

Из второго уравнения получаем: поскольку  $(A - B)i \neq 0$ , то  $\sin kr_0 = 0$ , значит,  $kr_0 = \pi n$ , тогда  $k = \frac{\pi n}{r_0}$ ,  $k^2 = \frac{\pi^2 n^2}{r_0^2} = \frac{2mE}{\hbar^2}$ .

$$\text{Откуда } E = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mr_0^2}.$$

**Ответ:** энергетический спектр частицы в сферически-симметричной потенциальной яме  $E = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mr_0^2}$ .

4. Имея в виду условие предыдущей задачи, найти:

а) нормированные собственные функции частицы в состояниях, где  $\psi(r)$  зависит только от  $r$ ;

б) для основного состояния частицы наиболее вероятное значение  $r_{\text{вер}}$ , а также вероятность нахождения частицы в области  $r < r_{\text{вер}}$ .

**Решение:**

а) согласно решению предыдущей задачи  $\chi(r) = 2Ai \sin \frac{\pi n}{r_0} r$ .

Так как применялась подстановка  $\psi(r) = \frac{\chi(r)}{r}$ , то  $\psi = \frac{2Ai}{r} \sin \frac{\pi n}{r_0} r$ .

Для нахождения коэффициента  $A$  используем условие нормировки:  $P = \int_V |\psi|^2 dV = 1$ , где  $dV = 4\pi r^2 \partial r$  – элементарный объем тонкой сферы толщиной  $\partial r$ .

$$1 = \int_0^{r_0} \frac{4A^2 i^2}{r^2} \sin^2 \left( \frac{\pi n}{r_0} r \right) \cdot 4\pi r^2 dr = \frac{16\pi i^2 A^2}{2} \int_0^{r_0} \left( 1 - \cos \left( \frac{2\pi n}{r_0} r \right) \right) dr =$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{8\pi i^2 A^2 r_0}{2\pi n} \int_0^{r_0} \left(1 - \cos\left(\frac{2\pi n}{r_0} r\right)\right) d\left(\frac{2\pi n}{r_0} r\right) = \frac{4i^2 A^2 r_0}{n} \left(\frac{2\pi n}{r_0} r - \sin\left(\frac{2\pi n}{r_0} r\right)\right) \Bigg|_0^{r_0} = \\
&= \frac{4i^2 A^2 r_0}{n} \cdot 2\pi n = 8\pi i^2 A^2 r_0.
\end{aligned}$$

Таким образом, коэффициент  $A = \frac{1}{2i\sqrt{2\pi r_0}}$ .

Запишем  $\psi$ -функцию в явном виде:

$$\psi(r) = \frac{2i}{r} \cdot \frac{1}{2i\sqrt{2\pi r_0}} \cdot \sin\left(\frac{\pi n}{r_0} r\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi r_0}} \cdot \frac{\sin\left(\frac{\pi n}{r_0} r\right)}{r} - \text{это и есть нормированные собственные функции частицы, находящейся в сферически-симметричной яме;}$$

б) наиболее вероятное значение  $r_{\text{вер}}$  можно рассчитать, исследовав функцию плотности вероятности на экстремум.

$$\text{Объемная плотность вероятности } |\psi^2| = \frac{dP}{dr} = \rho_{\text{вер}}.$$

Если исследуется вероятность нахождения частицы на расстоянии  $r$  от центра сферически-симметричной ямы, то необходимо перейти от дифференцирования по объему  $V$  к дифференцированию по расстоянию  $r$ :

$$|\psi^2| = \frac{dP}{4\pi r^2 dr}, \quad \frac{dP}{dr} = |\psi^2| 4\pi r^2.$$

Тогда

$$\rho_{\text{вер}} = \frac{dP}{dr} = |\psi^2| 4\pi r^2 = \frac{1}{2\pi r_0} \cdot \frac{1}{r^2} \sin^2\left(\frac{\pi n}{r_0} r\right) \cdot 4\pi r^2 = \frac{2}{r_0} \sin^2\left(\frac{\pi n}{r_0} r\right).$$

$$\text{Для основного состояния } n = 1: \rho_{\text{вер}} = \frac{2}{r_0} \sin^2\left(\frac{\pi}{r_0} r\right).$$

Найдем первую производную плотности вероятности и приравняем ее к нулю:

$$\frac{d\rho_{\text{вер}}}{dr} = \left(\frac{2}{r_0} \sin^2\left(\frac{\pi}{r_0} r\right)\right)'_r = \frac{2}{r_0} \cdot 2 \sin\left(\frac{\pi}{r_0} r\right) \cdot \frac{\pi}{r_0} \cos\left(\frac{\pi}{r_0} r\right) = \frac{2\pi}{r_0^2} \sin\left(\frac{2\pi}{r_0} r\right) = 0.$$

$$\text{Тогда } \frac{2\pi r}{r_0} = \pi, \text{ значит, } r_{\text{вер}} = \frac{r_0}{2}.$$

Проверим, соответствует ли данная точка максимуму функции  $\rho_{\text{вер}}(r)$ .

Для этого возьмем вторую производную:

$$\frac{d^2\rho_{\text{вер}}}{dr^2} = \left(\frac{2\pi}{r_0^2} \sin\left(\frac{2\pi}{r_0} r\right)\right)'_r = \frac{4\pi^2}{r_0^3} \cos\left(\frac{2\pi}{r_0} r\right).$$

Подставим найденное значение  $r_{\text{вер}} = \frac{r_0}{2}$ :

$$\frac{d^2\rho_{\text{вер}}}{dr^2} = \frac{4\pi^2}{r_0^3} \cos\left(\frac{2\pi}{r_0} r\right) = \frac{4\pi^2}{r_0^3} \cos\pi < 0.$$

Так как вторая производная функции  $\frac{d^2 \rho_{\text{вер}}}{dr^2} < 0$ , то найденная точка соответствует максимуму, что и требовалось по условию.

Найдем вероятность нахождения частицы в области  $r < r_{\text{вер}}$ :

$$P_{0-r_{\text{вер}}} = \int_0^{r_0/2} \frac{2}{r^2} \sin^2\left(\frac{\pi}{r_0} r\right) dr = \frac{2}{r_0} \cdot \frac{r_0}{2\pi \cdot 2} \int_0^{r_0/2} \left(1 - \cos\left(\frac{2\pi}{r_0} r\right)\right) d\left(\frac{2\pi}{r_0} r\right) =$$

$$= \frac{1}{2\pi} \left(\frac{2\pi}{r_0} r - \sin\left(\frac{2\pi}{r_0} r\right)\right) \Bigg|_0^{r_0/2} = \frac{1}{2\pi} \cdot \pi = \frac{1}{2} \text{ или } P_{0-r_{\text{вер}}} = 50 \%$$

**Ответ:** а)  $\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{2\pi r_0}} \cdot \frac{\sin\left(\frac{\pi n}{r_0} r\right)}{r}$ ; б)  $r_{\text{вер}} = \frac{r_0}{2}$ ;  $P_{0-r_{\text{вер}}} = 50 \%$ .

5. Волновая функция частицы массой  $m$  для основного состояния в одномерном потенциальном поле  $U(x) = \frac{kx^2}{2}$  имеет вид  $\psi(x) = Ae^{-\alpha x^2}$ , где  $A$  и  $\alpha$  – некоторые постоянные. Найти с помощью уравнения Шрёдингера постоянную  $\alpha$  и энергию  $E$  частицы в этом состоянии.

**Решение.** Запишем стационарное уравнение Шрёдингера в общем виде:

$$\hat{H}\psi = E\psi.$$

Применим уравнение Шрёдингера для потенциального поля:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi + U\psi = E\psi \text{ или } -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U)\psi = 0.$$

Воздействуем оператором Лапласа на функцию  $\psi(x) = Ae^{-\alpha x^2}$ :

$$\Delta\psi = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 (Ae^{-\alpha x^2})}{\partial x^2} = A \frac{\partial}{\partial x} (-2\alpha x e^{-\alpha x^2}) =$$

$$= -2\alpha A (e^{-\alpha x^2} (-2\alpha x)x + e^{-\alpha x^2}) = 2\alpha(-1 + 2\alpha x^2) \cdot Ae^{-\alpha x^2}.$$

Подставим полученное выражение в уравнение Шрёдингера и преобразуем полученное выражение:

$$2\alpha(-1 + 2\alpha x^2) \cdot Ae^{-\alpha x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{kx^2}{2}\right) Ae^{-\alpha x^2} = 0;$$

$$2\alpha(-1 + 2\alpha x^2) + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{kx^2}{2}\right) = 0;$$

$$2\alpha^2 x^2 - \alpha + \frac{m}{\hbar^2} E - \frac{mkx^2}{2\hbar^2} = 0.$$

Перераспределим слагаемые по принадлежности к  $x^n$ :

$$\left(2\alpha^2 - \frac{mk}{2\hbar^2}\right) x^2 + \left(\frac{m}{\hbar^2} E - \alpha\right) x^0 = 0.$$

Получим степенной ряд вида  $C_0x^0 + C_1x^1 + \dots + C_{n-1}x^{n-1} + C_nx^n = 0$ , в котором все константы  $C_n$  должны быть равны нулю.

$$\text{Тогда } 2\alpha^2 - \frac{mk^2}{2\hbar^2} = 0, \text{ значит, } \alpha = \frac{\sqrt{mk}}{2\hbar}.$$

Учитывая, что  $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$  – циклическая частота гармонического осциллятора, то  $\alpha = \frac{m\omega}{2\hbar}$ .

$$\frac{m}{\hbar^2}E - \alpha = 0, \text{ значит, } E = \frac{\alpha\hbar^2}{m} = \frac{m\omega}{2\hbar} \cdot \frac{\hbar^2}{m} = \frac{\hbar\omega}{2}.$$

Получили  $E = \frac{\hbar\omega}{2}$  – минимальная энергия гармонического осциллятора.

**Ответ:**  $\alpha = \frac{m\omega}{2\hbar}; E = \frac{\hbar\omega}{2}.$

**6.** Волновая функция электрона в основном состоянии атома водорода имеет вид  $\psi(r) = Ae^{-r/r_1}$ , где  $A$  – некоторая постоянная;  $r_1$  – первый борковский радиус. Найти:

- а) наиболее вероятное расстояние между электронами и ядром;
- б) среднее значение модуля кулоновской силы, действующей на электрон;
- в) среднее значение потенциальной энергии электрона в поле ядра;
- г) энергию частицы в этом состоянии.

**Решение:**

а) атом водорода будем рассматривать, как сферически-симметричную систему и считать, что  $\psi(r)$  зависит только от  $r$  (см. задачу 4 данного раздела).

Для нахождения постоянной  $A$  используем условие нормировки:  $P = \int_V |\psi|^2 dV = 1$ , где  $dV = 4\pi r^2 dr$  – элементарный объем тонкой сферы толщиной  $dr$ .

$$1 = \int_0^\infty A^2 e^{\frac{-2r}{r_1}} \cdot 4\pi r^2 dr = 4\pi A^2 \int_0^\infty r^2 e^{\frac{-2r}{r_1}} dr = \left| \begin{array}{l} r^2 = \left(\frac{2r}{r_1}\right)^2 \cdot \frac{r_1^2}{4} \\ dr = \frac{r_1}{2} d\left(\frac{2r}{r_1}\right) \end{array} \right| =$$

$$= 4\pi A^2 \cdot \frac{r_1^3}{8} \int_0^\infty \left(\frac{2r}{r_1}\right)^2 e^{\frac{-2r}{r_1}} d\left(\frac{2r}{r_1}\right) = \frac{\pi A^2 r_1^3}{2} \cdot 2 = \pi A^2 r_1^3.$$

Таким образом,  $A = \frac{1}{\sqrt{\pi r_1^3}}$ .

Запишем  $\psi$ -функцию в явном виде:  $\psi = \frac{1}{\sqrt{\pi r_1^3}} e^{\frac{-r}{r_1}}$ .

Наиболее вероятное значение  $r_{\text{вер}}$  можно рассчитать, исследовав функцию плотности вероятности на экстремум (см. задачу 4 данного раздела).

$$\rho_{\text{вер}}(r) = \psi^2 \cdot 4\pi r^2 = \frac{4\pi r^2}{\pi r_1^3} e^{-\frac{2r}{r_1}} = \frac{4r^2}{r_1^3} e^{-\frac{2r}{r_1}}.$$

$$\frac{d\rho(r)}{dr} = \left( \frac{4r^2}{r_1^3} e^{-\frac{2r}{r_1}} \right)' = \frac{8r}{r_1^3} e^{-\frac{2r}{r_1}} - \frac{8r^2}{r_1^4} e^{-\frac{2r}{r_1}} = 0, \text{ тогда } \frac{r}{r_1} = 1.$$

Значит,  $r_{\text{вер}} = r_1$ ;

б) среднее значение непрерывной случайной величины  $X(x)$ , возможные значения которой принадлежат отрезку  $[a, b]$ , называется *математическим ожиданием* и находится как определенный интеграл  $\langle X \rangle = \int_a^b X\rho(x)dx$ , где  $\rho(x)$  – плотность вероятности нахождения данной величины в разных точках отрезка  $[a, b]$ .

Найдем среднее значение модуля кулоновской силы, действующей на электрон:

$$\begin{aligned} \langle F \rangle &= \int_0^\infty F|\psi|^2 4\pi r^2 dr = \int_0^\infty \frac{ke^2}{r^2} \cdot \frac{1}{\pi r_1^3} e^{-\frac{2r}{r_1}} \cdot 4\pi r^2 dr = \frac{4ke^2}{r_1^3} \int_0^\infty e^{-\frac{2r}{r_1}} d\left(\frac{2r}{r_1}\right) = \\ &= \frac{4ke^2}{r_1^3} \cdot \frac{r_1}{2} \cdot 2 = \frac{2ke^2}{r_1^2}, \end{aligned}$$

$$\text{где } k = \frac{1}{4\pi\epsilon_0};$$

в) найдем среднее значение потенциальной энергии электрона в поле ядра:

$$\begin{aligned} \langle U \rangle &= \int_0^\infty U|\psi|^2 4\pi r^2 dr = \int_0^\infty \left(-\frac{ke^2}{r}\right) \cdot \frac{1}{\pi r_1^3} e^{-\frac{2r}{r_1}} 4\pi r^2 dr = \\ &= -\frac{4ke^2}{r_1^3} \int_0^\infty r e^{-\frac{2r}{r_1}} dr = -\frac{4ke^2}{r_1^3} \int_0^\infty \frac{2r}{r_1} \cdot e^{-\frac{2r}{r_1}} d\left(\frac{2r}{r_1}\right) \cdot \frac{r_1^2}{4} = -\frac{ke^2}{r_1} \int_0^\infty \frac{2r}{r_1} \cdot e^{-\frac{2r}{r_1}} d\left(\frac{2r}{r_1}\right). \end{aligned}$$

$$\text{Табличный интеграл } \int_0^\infty \frac{2r}{r_1} \cdot e^{-\frac{2r}{r_1}} d\left(\frac{2r}{r_1}\right) = 1, \text{ поэтому } \langle U \rangle = -\frac{ke^2}{r_1};$$

г) для нахождения энергии электрона в атоме водорода в основном состоянии запишем стационарное уравнение Шрёдингера в общем виде:

$$\hat{H}\psi = E\psi \text{ или } \Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\psi = 0.$$

Применим оператор Лапласа в сферических координатах:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \cdot \frac{\partial\psi}{\partial r} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\psi = 0.$$

Учитывая, что потенциальная энергия электрона в поле ядра равна  $U = -\frac{ke^2}{r}$ , получим  $\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E + \frac{ke^2}{r} \right) \psi = 0$ .

Используя явный вид волновой функции, найдем  $\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2}$  и  $\frac{\partial \psi}{\partial r}$ :

$$\frac{\partial \psi}{\partial r} = -\frac{1}{r_1} \cdot \frac{1}{\sqrt{\pi r_1^3}} \cdot e^{-\frac{r}{r_1}}; \quad \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} = \frac{\partial \left( -\frac{1}{r_1} \cdot \frac{1}{\sqrt{\pi r_1^3}} \cdot e^{-\frac{r}{r_1}} \right)}{\partial r} = \frac{1}{r_1^2} \cdot \frac{1}{\sqrt{\pi r_1^3}} \cdot e^{-\frac{r}{r_1}}.$$

Подставим полученные выражения в уравнение Шрёдингера:

$$\frac{1}{r_1^2} \cdot \frac{1}{\sqrt{\pi r_1^3}} \cdot e^{-\frac{r}{r_1}} - \frac{2}{r} \cdot \frac{1}{r_1} \cdot \frac{1}{\sqrt{\pi r_1^3}} \cdot e^{-\frac{r}{r_1}} + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E + \frac{ke^2}{r} \right) \frac{1}{\sqrt{\pi r_1^3}} \cdot e^{-\frac{r}{r_1}} = 0;$$

$$\frac{1}{r_1^2} - \frac{2}{r} \cdot \frac{1}{r_1} + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E + \frac{ke^2}{r} \right) = 0;$$

$$\left( \frac{1}{r_1^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \right) r + \left( \frac{mke^2}{\hbar^2} - \frac{1}{r_1} \right) \cdot 2 = 0.$$

Получили степенной ряд  $C_0 x^0 + C_1 x^1 + \dots + C_{n-1} x^{n-1} + C_n x^n = 0$  (см. задачу 5 данного раздела).

Значит,  $\frac{1}{r_1^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} = 0$ , тогда  $E = \frac{-mk^2 e^4}{2\hbar^2}$ , что соответствует энергии электрона на первой боровской орбите.

**Ответ:** а)  $r_{\text{вер}} = r_1$ ; б)  $\langle F \rangle = \frac{2ke^2}{r_1^2}$ ; в)  $\langle U \rangle = -\frac{ke^2}{r_1}$ ; г)  $E = \frac{-mk^2 e^4}{2\hbar^2}$ .

7. Определить энергию электрона атома водорода в состоянии, для которого волновая функция имеет вид  $\psi(r) = A(1 + ar)e^{-\alpha r}$ , где  $A$ ,  $a$  и  $\alpha$  – некоторые постоянные. Найти их.

**Решение.** Запишем стационарное уравнение Шрёдингера в общем виде:

$$\hat{H}\psi = E\psi \text{ или } \Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\psi = 0.$$

Применим оператор Лапласа в сферических координатах:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\psi = 0.$$

Учитывая, что потенциальная энергия электрона в поле ядра равна

$$U = -\frac{ke^2}{r}, \text{ получим } \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E + \frac{ke^2}{r} \right) \psi = 0.$$

Найдем  $\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2}$  и  $\frac{\partial \psi}{\partial r}$ :

$$\frac{\partial \psi}{\partial r} = Aae^{-\alpha r} - A\alpha(1 + ar)e^{-\alpha r};$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} &= \frac{\partial(Aae^{-\alpha r} - A\alpha(1 + ar)e^{-\alpha r})}{\partial r} = Aa\alpha e^{-\alpha r} - (Aa\alpha e^{-\alpha r} - A\alpha^2(1 + ar)e^{-\alpha r}) = \\ &= -2Aa\alpha e^{-\alpha r} + A\alpha^2(1 + ar)e^{-\alpha r}. \end{aligned}$$

Подставим полученные выражения в уравнение Шрёдингера и проведем математические преобразования:

$$\begin{aligned} &-2Aa\alpha e^{-\alpha r} + A\alpha^2 e^{-\alpha r} + A\alpha^2 ar e^{-\alpha r} + \frac{2Aa}{r} e^{-\alpha r} - \frac{2A\alpha}{r} e^{-\alpha r} - \frac{2A\alpha ar}{r} e^{-\alpha r} + \\ &+ \frac{2mEA}{\hbar^2} e^{-\alpha r} + \frac{2mEAar}{\hbar^2} e^{-\alpha r} + \frac{2mke^2 A}{r\hbar^2} e^{-\alpha r} + \frac{2mke^2 Aa}{r\hbar^2} e^{-\alpha r} = 0; \\ &-2a\alpha r + \alpha^2 r + \alpha^2 ar^2 + 2a - 2\alpha - 2a\alpha r + \frac{2mE}{\hbar^2} r + \frac{2mEa}{\hbar^2} r^2 + \frac{2mke^2}{\hbar^2} + \\ &+ \frac{2mke^2 a}{\hbar^2} r = 0; \\ &-4a\alpha r + \alpha^2 r + \alpha^2 ar^2 + 2a - 2\alpha + \frac{2mE}{\hbar^2} r + \frac{2mEa}{\hbar^2} r^2 + \frac{2mke^2}{\hbar^2} + \frac{2mke^2 a}{\hbar^2} r = 0. \end{aligned}$$

Приведем полученное выражение к степенному ряду вида

$C_0 x^0 + C_1 x^1 + \dots + C_{n-1} x^{n-1} + C_n x^n = 0$  (см. задачу 5 данного раздела):

$$\left(a - \alpha + \frac{mke^2}{\hbar^2}\right) \cdot 2 + \left(\alpha^2 - 4a\alpha + \frac{2mE}{\hbar^2} + \frac{2amke^2}{\hbar^2}\right) r + \left(\alpha^2 + \frac{2mE}{\hbar^2}\right) ar^2 = 0.$$

$$\text{Тогда } a - \alpha + \frac{mke^2}{\hbar^2} = 0, \text{ откуда } \alpha = a + \frac{mke^2}{\hbar^2}. \quad (10)$$

$$\alpha^2 + \frac{2mE}{\hbar^2} = 0, \text{ значит, } \alpha^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}. \quad (11)$$

$$\alpha^2 - 4a\alpha + \frac{2mE}{\hbar^2} + \frac{2amke^2}{\hbar^2} = 0. \quad (12)$$

Подставим выражения (10) и (11) в формулу (12):

$$-\frac{2mE}{\hbar^2} - 4a \left(a + \frac{mke^2}{\hbar^2}\right) + \frac{2mE}{\hbar^2} + \frac{2amke^2}{\hbar^2} = 0;$$

$$-2a^2 - \frac{2mke^2}{\hbar^2} a + \frac{mke^2}{\hbar^2} a = 0;$$

$$2a + \frac{mke^2}{\hbar^2} = 0;$$

$$a = -\frac{mke^2}{2\hbar^2}.$$

$$\text{Тогда } \alpha = a + \frac{mke^2}{\hbar^2} = -\frac{mke^2}{2\hbar^2} + \frac{mke^2}{\hbar^2};$$

$$\alpha = \frac{mke^2}{2\hbar^2}, \text{ т. е. } a = -\alpha.$$

Из (11) получаем  $E = -\frac{mk^2e^4}{8\hbar^2}$ , что соответствует энергетическому уровню с главным квантовым числом  $n = 2$ .

Для нахождения коэффициента  $A$  используем условие нормировки  $\psi$ -функции:

$$P = \int_V |\psi|^2 dV = 1, \text{ где } dV = 4\pi r^2 dr;$$

$$\begin{aligned} 1 &= \int_0^\infty \psi^2 \cdot 4\pi r^2 dr = \int_0^\infty A^2 (1 + ar)^2 e^{-2\alpha r} \cdot 4\pi r^2 dr = \\ &= \int_0^\infty A^2 (1 - \alpha r)^2 e^{-2\alpha r} \cdot 4\pi r^2 dr = 4\pi A^2 \int_0^\infty (1 - 2\alpha r + \alpha^2 r^2) r^2 e^{-2\alpha r} dr = \\ &= 4\pi A^2 \left( \int_0^\infty r^2 e^{-2\alpha r} dr - 2\alpha \int_0^\infty r^3 e^{-2\alpha r} dr + \alpha^2 \int_0^\infty r^4 e^{-2\alpha r} dr \right) = \\ &= 4\pi A^2 \left( \int_0^\infty (2\alpha r)^2 e^{-2\alpha r} d(2\alpha r) \cdot \frac{1}{(2\alpha)^3} - 2\alpha \int_0^\infty (2\alpha r)^3 e^{-2\alpha r} d(2\alpha r) \cdot \frac{1}{(2\alpha)^4} + \right. \\ &\left. + \alpha^2 \int_0^\infty (2\alpha r)^4 e^{-2\alpha r} d(2\alpha r) \cdot \frac{1}{(2\alpha)^5} \right). \end{aligned}$$

Получили выражения вида  $\Gamma(n) = \int_0^\infty x^n e^{-x} dx$ , которые называются гамма-функцией, или эйлеровым интегралом второго рода. Данный интеграл принимает следующие значения:

$$\Gamma(0) = 1; \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}; \Gamma(n) = n!, \text{ где } n = 1, 2, 3 \dots$$

$$\text{Тогда } 4\pi A^2 \left( \frac{2!}{(2\alpha)^3} - \frac{2\alpha \cdot 3!}{(2\alpha)^4} + \frac{\alpha^2 \cdot 4!}{(2\alpha)^5} \right) = \frac{4\pi A^2}{8\alpha^3} (2 - 6 + 6) = \frac{\pi A^2}{\alpha^3} = 1, \text{ откуда}$$

$$A = \sqrt{\frac{\alpha^3}{\pi}}.$$

$$\text{Учитывая, что } \alpha = \frac{mke^2}{2\hbar^2}, \text{ получаем } A = \sqrt{\left(\frac{mke^2}{2\hbar^2}\right)^3 \cdot \frac{1}{\pi}}.$$

Можно записать выражение для  $\psi$ -функции в явном виде:

$$\psi(r) = \sqrt{\frac{(mke^2)^3}{8\pi \cdot \hbar^6}} \left(1 - \frac{mke^2}{2\hbar^2} r\right) e^{-\frac{mke^2}{2\hbar^2} r}.$$

$$\text{Ответ: } E = -\frac{mk^2e^4}{8\hbar^2}; a = -\frac{mke^2}{2\hbar^2}; \alpha = \frac{mke^2}{2\hbar^2}; A = \sqrt{\left(\frac{mke^2}{2\hbar^2}\right)^3 \cdot \frac{1}{\pi}}.$$

## 4.2. Задачи для самостоятельного решения

1. Частица находится в одномерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. Ширина ямы  $l$ . Найти нормированные волновые функции стационарных состояний частицы, взяв начало отсчета координаты  $x$  в середине ямы.

$$\text{Ответ: } \begin{cases} 1. \psi = 2Ai \sin \frac{\pi n_2}{l} x = 2 \cdot \frac{1}{i\sqrt{2}l} i \sin \frac{\pi n_2}{l} x = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{\pi n_2}{l} x & n_2 = 2, 4, 6 \dots \\ 2. \psi = 2A \cos \frac{\pi n_1}{l} x = 2 \cdot \frac{1}{\sqrt{2}l} \cos \frac{\pi n_1}{l} x = \sqrt{\frac{2}{l}} \cos \frac{\pi n_1}{l} x & n_1 = 1, 3, 5 \dots \end{cases}$$

2. Частица массой  $m$  находится в двумерной прямоугольной потенциальной яме с абсолютно непроницаемыми стенками. Найти:

а) возможные значения энергии частицы, если стороны ямы равны  $l_1$  и  $l_2$ ;

б) значения энергии частицы на первых четырех уровнях, если яма квадратная со стороной  $l$ .

$$\text{Ответ: а) } E_x = \frac{\hbar^2 n_1^2 \pi^2}{2ml_1^2}; E_y = \frac{\hbar^2 n_2^2 \pi^2}{2ml_2^2}; E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left( \frac{n_1^2}{l_1^2} + \frac{n_2^2}{l_2^2} \right); \text{ б) } E = \frac{\hbar^2 \pi^2 (n_1^2 + n_2^2)}{2ml^2};$$

$$E_1 = 9,86 \frac{\hbar^2}{ml^2}; E_2 = 24,65 \frac{\hbar^2}{ml^2}; E_3 = 39,44 \frac{\hbar^2}{ml^2}; E_4 = 49,3 \frac{\hbar^2}{ml^2}.$$

3. Частица находится в прямоугольной двумерной потенциальной яме с абсолютно непроницаемыми стенками ( $0 < x < a$ ) ( $0 < y < b$ ). Определить вероятность нахождения частицы с наименьшей энергией в области ( $0 < x < \frac{a}{3}$ ).

$$\text{Ответ: } \begin{aligned} n_1 = 1 & \quad P\left(0 - \frac{a}{3}\right) = \frac{1}{3} - \frac{\sqrt{3}}{4\pi} = 0,33 - 0,14 \approx 0,195 & \quad P = 19,5 \% \\ n_1 = 2 & \quad P\left(0 - \frac{a}{3}\right) = \frac{1}{3} + \frac{\sqrt{3}}{8\pi} = 0,33 + 0,07 \approx 0,40 & \quad P = 40 \% \\ n_1 = 3 & \quad P\left(0 - \frac{a}{3}\right) = \frac{1}{3} + \frac{\sqrt{3}}{16\pi} = 0,33 + 0,03 \approx 0,36 & \quad P = 36 \% \\ n_1 = 4 & \quad P\left(0 - \frac{a}{3}\right) = \frac{1}{3} - \frac{\sqrt{3}}{32\pi} = 0,33 - 0,02 \approx 0,31 & \quad P = 31 \% \\ n_1 = 5 & \quad P\left(0 - \frac{a}{3}\right) = \frac{1}{3} - \frac{\sqrt{3}}{64\pi} = 0,33 - 0,009 \approx 0,32 & \quad P = 32 \%. \end{aligned}$$

4. Частица находится в сферически-симметричном потенциальном поле в стационарном состоянии  $\psi = \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} \cdot \frac{e^{-r/a}}{r}$ , где  $r$  – расстояние от центра поля. Найти среднее  $\langle r \rangle$ .

$$\text{Ответ: } \langle r \rangle = \frac{a}{2}.$$

5. Частица массой  $m$  находится в одномерном потенциальном поле  $U(x) = kx^2$ , где  $k$  – положительная постоянная. Найти среднюю потенциаль-

ную энергию  $\langle U \rangle$  частицы в состоянии, описываемом волновой функцией  $\psi = Ae^{-\alpha x^2}$ , где  $A$  и  $\alpha$  – неизвестные постоянные.

Ответ:  $\alpha = \sqrt{\frac{m\kappa}{2\hbar^2}}$ ;  $A^2 = \sqrt{\frac{8\alpha}{\pi}}$ ;  $\langle U \rangle = \frac{\kappa}{4\alpha} = \frac{\hbar}{4} \sqrt{\frac{2\kappa}{m}}$ .

## 5. ПРОХОЖДЕНИЕ ЧАСТИЦ ЧЕРЕЗ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ БАРЬЕР

Потенциальный барьер – ограниченная в пространстве область высокой потенциальной энергии частицы в силовом поле, по обе стороны от которой энергия более или менее резко падает. Характеризуется «высотой» – минимальной энергией классической частицы, необходимой для преодоления барьера.

Согласно классической механике, частица с энергией  $E < U_0$  ( $U_0$  – высота барьера), движущаяся в таком поле слева направо, дойдя до потенциальной стенки, отражается от нее, начиная двигаться в обратном направлении. Если же энергия частицы  $E > U_0$ , то частица продолжает двигаться в прежнем направлении с уменьшенной скоростью. В квантовой механике возникает новое явление: даже при  $E > U_0$  частица может отразиться от потенциальной стенки, и при  $E < U_0$  падающая на барьер частица может с отличной от нуля вероятностью пройти сквозь него (*туннельный эффект*).

### Полная энергия частицы меньше высоты барьера $E < U_0$

Рассмотрим простейший потенциальный барьер прямоугольной формы для одномерного движения частицы (рис. 10).

Запишем стационарное уравнение Шрёдингера:  $\hat{H}\psi = E\psi$ .

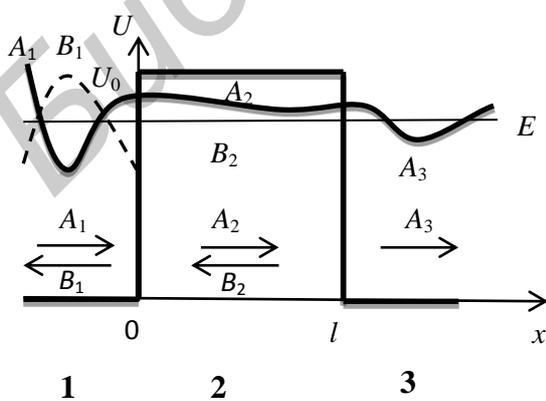


Рис. 10

Для областей 1 и 3

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi = 0;$$

для области 2  $\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0) \psi = 0$

или  $\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E) \psi = 0$ .

Введем обозначения:  $\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$  и

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

Для областей 1 и 3 получим

характеристическое уравнение  $\lambda^2 + \frac{2m}{\hbar^2}E = 0$ .

Откуда  $\lambda_{1,3} = \pm i\alpha$ , где  $\alpha = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}$ .

Для области **2** характеристическое уравнение будет иметь вид  $\lambda^2 + \frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E) = 0$  или  $\lambda^2 + \beta^2 = 0$ .

Тогда  $\lambda_2 = \pm\beta$ , где  $\beta = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - E)}$ .

Получим общее решение уравнения Шрёдингера для трех областей:

$$\begin{cases} \psi_1 = A_1 e^{i\alpha x} + B_1 e^{-i\alpha x}, \\ \psi_2 = A_2 e^{\beta x} + B_2 e^{-\beta x}, \\ \psi_3 = A_3 e^{i\alpha x} + B_3 e^{-i\alpha x}, \end{cases}$$

где  $e^{i\alpha x}$  и  $e^{\beta x}$  – падающая волна для областей **1**, **2** и **3**;

$e^{-i\alpha x}$  и  $e^{-\beta x}$  – отраженная волна для областей **1** и **2**;

$|A_1|^2$  – вероятность попадания частицы на барьер,  $A_1 = 1$ ;

$|B_1|^2$  – вероятность отражения частицы от передней стенки барьера;

$|A_2|^2$  – вероятность прохождения частицы внутрь барьера и попадания ее на внутреннюю стенку;

$|B_2|^2$  – вероятность отражения частицы от внутренней стенки барьера;

$|A_3|^2$  – вероятность прохождения частицы через барьер;

$|B_3|^2$  – вероятность возврата частицы из бесконечности. Физических причин для этого нет, следовательно,  $B_3 = 0$ .

$$\text{Тогда } \begin{cases} \psi_1 = e^{i\alpha x} + B_1 e^{-i\alpha x}, \\ \psi_2 = A_2 e^{\beta x} + B_2 e^{-\beta x}, \\ \psi_3 = A_3 e^{i\alpha x}. \end{cases}$$

Применим граничные условия. На границах  $\psi$  должна быть непрерывной:

$$\psi_1(0) = \psi_2(0); \quad \psi_2(l) = \psi_3(l).$$

$$\text{Значит, } 1 + B_1 = A_2 + B_2 \text{ и } A_2 e^{\beta l} + B_2 e^{-\beta l} = A_3 e^{i\alpha l}.$$

Для того чтобы функция была гладкой, должны выполняться условия  $\psi_1'(0) = \psi_2'(0)$  и  $\psi_2'(l) = \psi_3'(l)$ .

$$\text{Тогда } i\alpha - i\alpha B_1 = \beta A_2 - \beta B_2 \text{ и } \beta A_2 e^{\beta l} - \beta B_2 e^{-\beta l} = i\alpha A_3 e^{i\alpha l}.$$

$$\text{Введем коэффициент } n = \frac{\beta}{\alpha} = \sqrt{\frac{U_0 - E}{E}}.$$

$$\text{Получим } 1 + B_1 = A_2 + B_2; \tag{13}$$

$$A_2 e^{\beta l} + B_2 e^{-\beta l} = A_3 e^{i\alpha l}; \tag{14}$$

$$i - iB_1 = nA_2 - nB_2; \tag{15}$$

$$nA_2 e^{\beta l} - nB_2 e^{-\beta l} = iA_3 e^{i\alpha l}. \tag{16}$$

Умножим уравнение (13) на  $i$  и сложим уравнения (13) и (15):

$$i + iB_1 + i - iB_1 = iA_2 + iB_2 + nA_2 - nB_2.$$

$$\text{Получим } 2i = (i + n)A_2 + (i - n)B_2. \quad (17)$$

Умножим уравнение (14) на  $i$  и вычтем его из (16):

$$nA_2e^{\beta l} - nB_2e^{-\beta l} - A_2e^{\beta l} - iB_2e^{-\beta l} = iA_3e^{i\alpha l} - iA_3e^{i\alpha l}.$$

$$\text{Получим } (n - i)A_2e^{\beta l} - (n + i)B_2e^{-\beta l} = 0. \quad (18)$$

$$\text{Из (17) } B_2 = \frac{2i - (i+n)A_2}{(i-n)},$$

$$\text{из (18) } B_2 = \frac{(n-i)A_2e^{\beta l}}{(n+i)e^{-\beta l}}.$$

Приравняем полученные выражения:  $\frac{2i - (i+n)A_2}{(i-n)} = \frac{(n-i)A_2e^{\beta l}}{(n+i)e^{-\beta l}}$ ;

$$2i(i+n)e^{-\beta l} - (i+n)^2A_2e^{-\beta l} = -(n-i)^2A_2e^{\beta l};$$

$$A_2((n+i)^2e^{-\beta l} - (n-i)^2e^{\beta l}) = 2i(i+n)e^{-\beta l};$$

$$A_2 = \frac{2i(n+i)e^{-\beta l}}{(n+i)^2e^{-\beta l} - (n-i)^2e^{\beta l}}.$$

Подставим значение  $A_2$  в выражение  $B_2 = \frac{(n-i)A_2e^{\beta l}}{(n+i)e^{-\beta l}}$ , получим

$$B_2 = \frac{(n-i)e^{\beta l}}{(n+i)e^{-\beta l}} \cdot \frac{2i(n+i)e^{-\beta l}}{(n+i)^2e^{-\beta l} - (n-i)^2e^{\beta l}};$$

$$B_2 = \frac{2i(n-i)e^{\beta l}}{(n+i)^2e^{-\beta l} - (n-i)^2e^{\beta l}}.$$

Отношение модулей амплитуд отраженной и падающей волны определяет вероятность отражения частицы от потенциального барьера и называется

$$\text{коэффициентом отражения: } R = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2}.$$

Так как  $A_1=1$ , то  $R = |B_1|^2$ .

Отношение квадратов модулей амплитуд прошедшей и падающей волны определяет вероятность прохождения частицы сквозь барьер и называется

$$\text{коэффициентом прохождения (коэффициентом прозрачности): } D = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2}.$$

Так как  $A_1=1$ , то  $D = |A_3|^2$ .

Коэффициенты связаны соотношением  $R + D = 1$  ( $|B_1|^2 + |A_3|^2 = 1$ ).

Из уравнения (14)

$$A_3 = \frac{A_2e^{\beta l} + B_2e^{-\beta l}}{e^{i\alpha l}} = \frac{2i(i+n)e^{-\beta l}e^{\beta l} + 2i(n-i)e^{\beta l}e^{-\beta l}}{((n+i)^2e^{-\beta l} - (n-i)^2e^{\beta l})e^{i\alpha l}} = \frac{4ine^{-i\alpha l}}{(n+i)^2e^{-\beta l} - (n-i)^2e^{\beta l}}.$$

Так как  $\beta l = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar} l \gg 1$ , то  $e^{-\beta l} \ll e^{\beta l}$  и  $A_3 \approx \frac{4ine^{-i\alpha l}}{(n-i)^2} e^{\beta l}$  (поскольку

комплексные числа  $n + i$  и  $n - i$  имеют одинаковый модуль).

Учитывая, что  $(n - i)^2 = n^2 + 1$ , получим  $A_3 = \frac{4ine^{-i\alpha l}}{n^2 + 1} e^{\beta l}$ , тогда прозрачность барьера

$$D = |A_3|^2 = \frac{16n^2 e^{-i2\alpha l}}{(n^2 + i)^2} e^{-2\beta l} = D_0 e^{-2\beta l},$$

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{2l}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}\right),$$

где  $D_0 = \frac{16n^2 e^{-i2\alpha l}}{(n^2 + i)^2}$ .

Величина  $\frac{16n^2}{(n^2 + i)^2}$  имеет величину порядка единицы ( $D_0 \approx 1$ ). Поэтому можно считать, что  $D \approx \exp(-2\beta l) = \exp\left(-\frac{2l}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}\right)$ .

Из полученного выражения следует, что коэффициент прозрачности сильно зависит от ширины барьера  $l$  и от его превышения над  $E$ , т.е. от  $U_0 - E$ .

Если барьер произвольной формы, удовлетворяющей условиям так называемого квазиклассического приближения (достаточно гладкая форма кривой) (рис. 11), то коэффициент прозрачности

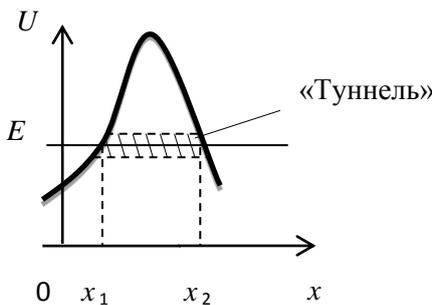


Рис. 11

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

где  $U = U(x)$ ;  $x_1$  – начало барьера;  $x_2$  – конец барьера;  $x_1, x_2$  находятся из условия  $U(x_1) = U(x_2) = E$ .

При преодолении потенциального барьера частица как бы проходит сквозь «туннель» в этом барьере, в связи с чем рассмотренное явление называют *туннельным эффектом*.

### Полная энергия частицы больше высоты барьера $E > U_0$

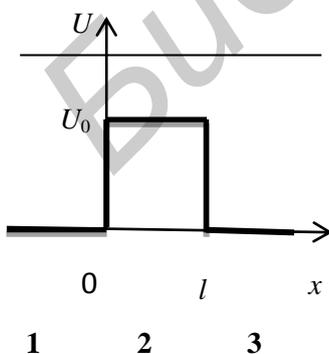


Рис. 12

Рассмотрим барьер прямоугольной формы для одномерного движения частицы (рис. 12).

Запишем стационарное уравнение Шрёдингера

$$\hat{H}\psi = E\psi \text{ или } \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U)\psi = 0.$$

Для областей 1 и 3:  $\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\psi = 0;$

для области 2:  $\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0)\psi = 0.$

Введем обозначения:  $\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$  и

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

Найдем общее решение уравнения Шрёдингера для трех областей в виде

$$\begin{cases} \psi_1 = A_1 e^{i\alpha x} + B_1 e^{-i\alpha x}, \\ \psi_2 = A_2 e^{i\beta x} + B_2 e^{-i\beta x}, \\ \psi_3 = A_3 e^{i\alpha x} + B_3 e^{-i\alpha x}, \end{cases}$$

или, учитывая, что  $A_1 = 1$  и  $B_3 = 0$ ,

$$\begin{cases} \psi_1 = e^{i\alpha x} + B_1 e^{-i\alpha x}, \\ \psi_2 = A_2 e^{i\beta x} + B_2 e^{-i\beta x}, \\ \psi_3 = A_3 e^{i\alpha x}. \end{cases}$$

Применим граничные условия. На границах  $\psi$  должна быть непрерывной:

$$\psi_1(0) = \psi_2(0); \psi_2(l) = \psi_3(l).$$

Значит,  $1 + B_1 = A_2 + B_2$  и  $A_2 e^{i\beta l} + B_2 e^{-i\beta l} = A_3 e^{i\alpha l}$ .

Для того чтобы функция была гладкой, должны выполняться условия  $\psi_1'(0) = \psi_2'(0)$  и  $\psi_2'(l) = \psi_3'(l)$ .

Тогда  $i\alpha - i\alpha B_1 = i\beta A_2 - i\beta B_2$  и

$$\beta A_2 e^{i\beta l} - \beta B_2 e^{-i\beta l} = \alpha A_3 e^{i\alpha l}.$$

Введем коэффициент  $n = \frac{\beta}{\alpha} = \sqrt{\frac{E - U_0}{E}}$ .

$$\text{Получим } 1 + B_1 = A_2 + B_2; \tag{19}$$

$$A_2 e^{i\beta l} + B_2 e^{-i\beta l} = A_3 e^{i\alpha l}; \tag{20}$$

$$i - B_1 = nA_2 - nB_2; \tag{21}$$

$$nA_2 e^{i\beta l} - nB_2 e^{-i\beta l} = A_3 e^{i\alpha l}. \tag{22}$$

Сложим уравнения (19) и (21):

$$2 = (n + 1)A_2 + (1 - n)B_2.$$

$$\text{Откуда } B_2 = \frac{2 - (n+1)A_2}{1-n} \tag{23}$$

Сложим уравнения (20) и (22):

$$(1 - n)A_2 e^{i\beta l} + (1 + n)B_2 e^{-i\beta l} = 0.$$

$$\text{Откуда } B_2 = \frac{(n-1)A_2 e^{i\beta l}}{(n+1)e^{-i\beta l}}. \tag{24}$$

Приравняем выражения (23) и (24) и проведем математические преобразования:

$$\frac{2 - (n+1)A_2}{1-n} = \frac{(n-1)A_2 e^{i\beta l}}{(n+1)e^{-i\beta l}};$$

$$2(n+1)e^{-i\beta l} - (n+1)^2 A_2 e^{-i\beta l} = -(n-1)^2 A_2 e^{i\beta l};$$

$$A_2((n+1)^2 e^{-i\beta l} - (n-1)^2 e^{i\beta l}) = 2(n+1)e^{-i\beta l}.$$

Получим  $A_2 = \frac{2(n+1)e^{-i\beta l}}{(n+1)^2 e^{-i\beta l} - (n-1)^2 e^{i\beta l}}$ .

Подставим данное выражение в формулу для  $B_2$ :

$$B_2 = \frac{-2}{n-1} + \frac{n+1}{n-1} \cdot \frac{2(n+1)e^{-i\beta l}}{(n+1)^2 e^{-i\beta l} - (n-1)^2 e^{i\beta l}} = \frac{-2(n+1)^2 e^{-i\beta l} + 2(n-1)^2 e^{i\beta l} + 2(n+1)e^{-i\beta l}}{(n-1)((n+1)^2 e^{-i\beta l} - (n-1)^2 e^{i\beta l})},$$

откуда  $B_2 = \frac{2(n-1)e^{i\beta l}}{(n+1)^2 e^{-i\beta l} - (n-1)^2 e^{i\beta l}}$ .

Из уравнения (22)

$$A_3 = \frac{A_2 e^{i\beta l} + B_2 e^{-i\beta l}}{e^{i\beta l}} = \frac{2(n+1)e^{-i\beta l} e^{i\beta l} + 2(n-1)e^{i\beta l} e^{-i\beta l}}{(n+1)^2 e^{-i\beta l} - (n-1)^2 e^{i\beta l}} e^{-i\alpha l} =$$

$$= \frac{4ne^{-i\alpha l}}{(n+1)^2 e^{-i\beta l} - (n-1)^2 e^{i\beta l}} \approx \frac{4ne^{-i\alpha l}}{-(n-1)^2} e^{-i\beta l}.$$

Коэффициент прозрачности барьера

$$D = |A_3|^2 = \frac{16n^2 e^{-i2\alpha l}}{(n-1)^4} e^{-i2\beta l} = D_0 e^{-i2\beta l},$$

где  $D_0 = \frac{16 \cdot \frac{E-U_0}{E} \cdot e^{-i2\alpha l}}{\left(\sqrt{\frac{E-U_0}{E}} - 1\right)^4} = \frac{16 \cdot (E-U_0)E \cdot e^{-i2l \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}}}{(\sqrt{E-U_0} - \sqrt{E})^4}$ .

Таким образом, при  $E > U_0$   $D = D_0 \exp\left(-i2l \frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar}\right)$  или  $D \approx \exp\left(-\frac{2l}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}\right)$ .

### 5.1. Примеры решения задач

1. Частицы массой  $m$  и с энергией  $E$  движутся слева на потенциальный барьер (рис. 13). Найти:

а) коэффициент отражения  $R$  этого барьера при  $E > U_0$ ;

б) эффективную глубину проникновения частиц в область  $x > 0$  при  $E > U_0$ , т. е. расстояние от границы барьера до точки, где плотность вероятности нахождения частицы уменьшается в  $e$  раз.

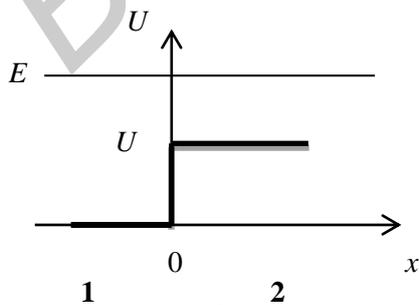


Рис. 13

**Решение:** а) запишем стационарное уравнение Шрёдингера:  $\hat{H}\psi = E\psi$  или  $\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0)\psi = 0$ .

Для области 1:  $\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\psi = 0$ ;

для области 2:  $\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0) \psi = 0$ .

Введем коэффициенты  $\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$ ,  $\beta^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0)$ .

Найдем общее решение уравнений Шрёдингера в виде

$$\begin{cases} \psi_1 = A_1 e^{i\alpha x} + B_1 e^{-i\alpha x}, \\ \psi_2 = A_2 e^{i\beta x} + B_2 e^{-i\beta x} \end{cases} \text{ или } \begin{cases} \psi_1 = e^{i\alpha x} + B_1 e^{-i\alpha x}, \\ \psi_2 = A_2 e^{i\beta x}. \end{cases}$$

Применим граничные условия  $\psi_1(0) = \psi_2(0)$ ;  $\psi_1'(0) = \psi_2'(0)$ .

Получим

$$\begin{cases} 1 + B_1 = A_2, \\ i - i\alpha B_1 = i\beta A_2. \end{cases}$$

Обозначим  $n = \frac{\beta}{\alpha}$ , тогда

$$\begin{cases} 1 + B_1 = A_2, \\ i - B_1 = n A_2. \end{cases}$$

Решим полученную систему уравнений:

$$i - B_1 = n + n B_1;$$

$$i - n = (n + 1) B_1;$$

$$B_1 = \frac{i-n}{n+1}.$$

Коэффициент отражения

$$R = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2} = |B_1|^2 = \left(\frac{i-n}{n+1}\right)^2 = \left(\frac{i-\frac{\beta}{\alpha}}{1+\frac{\beta}{\alpha}}\right)^2 = \left(\frac{\alpha-\beta}{\alpha+\beta}\right)^2;$$

б) вероятность прохождения частиц через барьер характеризуется коэффициентом прозрачности  $D = D_0 e^{-2\beta x}$ .

Плотность вероятности  $\rho = \frac{dD}{dx} = D_0 e^{-2\beta x} \cdot (-2\beta)$ .

По условию  $\rho(0) = e\rho(x)$ , тогда  $e^0 = e \cdot e^{-2\beta x}$ ;  $e^{-1} = e^{-2\beta x}$ ;  $1 = 2\beta x$ .

Откуда  $x = \frac{1}{2\beta}$ .

**Ответ:** а)  $R = \left(\frac{\alpha-\beta}{\alpha+\beta}\right)^2$ ; б)  $x = \frac{1}{2\beta}$ .

2. Воспользовавшись формулой для прозрачности барьера произвольной формы, найти для электрона с энергией  $E$  вероятность  $D$  прохождения потенциального барьера, ширина которого  $l$  и высота  $U_0$ , если барьер имеет форму, указанную на рис. 14.

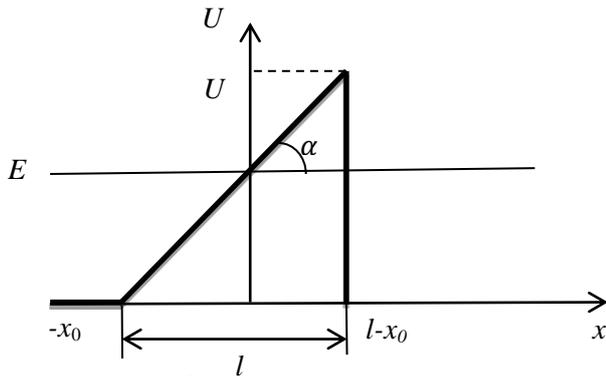


Рис. 14

Составим уравнение прямой, задающей форму барьера:

$$U(x) = E + kx = E + \operatorname{tg}\alpha \cdot x = E + \frac{U_0}{l}x.$$

Найдем отдельно значение выражения, являющегося показателем экспоненты:

$$\begin{aligned} -\frac{2}{\hbar} \int_0^{l-x_0} \sqrt{2m(U(x) - E)} dx &= -\frac{2\sqrt{2m}}{\hbar} \int_0^{l-\frac{E}{U_0}l} \sqrt{E + \frac{U_0}{l}x - E} dx = \\ &= -\frac{2\sqrt{2m}}{\hbar} \int_0^{l(1-\frac{E}{U_0})} \sqrt{\frac{U_0}{l}x} d\left(\frac{U_0}{l}x\right) \cdot \frac{l}{U_0} = -\frac{2\sqrt{2m}}{\hbar} \cdot \frac{l}{U_0} \int_0^{l(1-\frac{E}{U_0})} \left(\frac{U_0}{l}x\right)^{1/2} d\left(\frac{U_0}{l}x\right) = \\ &= -\frac{2\sqrt{2m}}{\hbar} \cdot \frac{l}{U_0} \frac{2\left(\frac{U_0}{l}x\right)^{3/2}}{3} \Big|_0^{l\left(1-\frac{E}{U_0}\right)} = -\frac{4\sqrt{2m}}{3\hbar} \cdot \frac{l}{U_0} \left( \left(\frac{U_0}{l}l\left(1-\frac{E}{U_0}\right)\right)^{3/2} - 0^{3/2} \right) = \\ &= -\frac{4\sqrt{2m}}{3\hbar} \cdot \frac{l}{U_0} \left(U_0 - U_0 \frac{E}{U_0}\right)^{3/2} = -\frac{4\sqrt{2m}}{3\hbar} \cdot \frac{l}{U_0} (U_0 - E)^{3/2}. \end{aligned}$$

Подставим полученное выражение в формулу для коэффициента прозрачности барьера:  $D \approx \exp\left(-\frac{4\sqrt{2m}}{3\hbar} \cdot \frac{l}{U_0} (U_0 - E)^{3/2}\right)$ .

**Ответ:**  $D \approx \exp\left(-\frac{4\sqrt{2m}}{3\hbar} \cdot \frac{l}{U_0} (U_0 - E)^{3/2}\right)$ .

**3.** Найти с помощью формулы для прозрачности барьера произвольной формы вероятность  $D$  прохождения частицы массой  $m$  и с энергией  $E$  сквозь потенциальный барьер, где  $U(x) = U_0\left(1 - \frac{x^2}{l^2}\right)$ .

**Решение.** Графиком функции  $U(x) = U_0\left(1 - \frac{x^2}{l^2}\right)$  будет являться парабола. Изобразим ее на рисунке рис. 15.

**Решение.** Коэффициент прозрачности барьера произвольной формы:

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

Найдем начало и конец барьера:

$$\operatorname{tg}\alpha = \frac{E}{x_0} = \frac{U_0}{l}, \text{ откуда } x_0 = \frac{E}{U_0}l, \text{ тогда}$$

$$x_1 = 0, x_2 = l - x_0 = l - \frac{E}{U_0}l.$$

Составим уравнение прямой, задающей форму барьера:

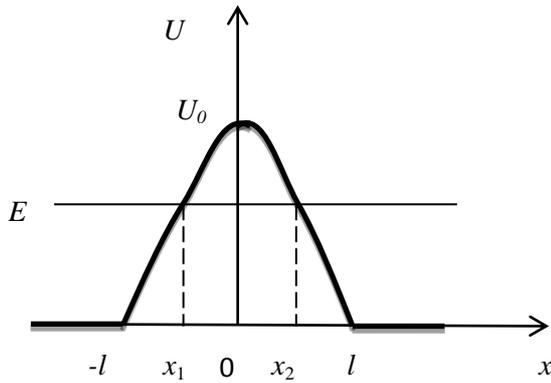


Рис. 15

Коэффициент прозрачности барьера произвольной формы:

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

Найдем начало и конец барьера: в точках  $x_1$  и  $x_2$   $E = U$ , поэтому

$$E = U_0 \left(1 - \frac{x^2}{l^2}\right), \text{ откуда } x_{1,2} = \mp \sqrt{1 - \frac{E}{U_0}} l.$$

Найдем отдельно значение выражения, являющегося показателем экспонен-

$$\begin{aligned} \text{ТЫ: } & -\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m\left(U_0\left(1 - \frac{x^2}{l^2}\right) - E\right)} dx = -\frac{2\sqrt{2m}}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{U_0 - \frac{U_0}{l^2}x^2 - E} dx = \\ & = -\frac{2\sqrt{2m}}{\hbar l} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{(U_0 - E)l^2 - U_0x^2} dx = \frac{2\sqrt{2mU_0}}{\hbar l} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{\left(1 - \frac{E}{U_0}\right)l^2 - x^2} dx = \\ & = \left| \text{введем обозначение: } \left(1 - \frac{E}{U_0}\right)l^2 = a^2 = x_{1,2}^2 \right| = \\ & = -\frac{2\sqrt{2mU_0}}{\hbar l} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{a^2 - x^2} dx = -\frac{2\sqrt{2mU_0}}{\hbar l} \left( \frac{x\sqrt{a^2 - x^2}}{2} + \frac{a^2}{2} \arcsin \frac{x}{a} \right) \Bigg|_{x_1}^{x_2} = \\ & = -\frac{2\sqrt{2mU_0}}{\hbar l} \left( 0 + \frac{a^2}{2} \arcsin \frac{x_1}{a} - \left( 0 + \frac{a^2}{2} \arcsin \frac{x_2}{a} \right) \right) = \\ & = -\frac{2\sqrt{2mU_0}}{\hbar l} \left( \frac{a^2}{2} \arcsin 1 + \frac{a^2}{2} \arcsin(-1) \right) = -\frac{2\sqrt{2mU_0}}{\hbar l} a^2 \arcsin 1 = \\ & = -\frac{2\sqrt{2mU_0}}{\hbar l} \left(1 - \frac{E}{U_0}\right) l^2 \cdot \frac{\pi}{2} = -\frac{2\sqrt{2mU_0}l}{\hbar U_0} (U_0 - E) \cdot \frac{\pi}{2} = -\frac{\pi l}{\hbar} \sqrt{\frac{2m}{U_0}} (U_0 - E). \end{aligned}$$

Подставим полученное выражение в формулу для коэффициента прозрачности барьера:  $D \approx \exp\left(-\frac{\pi l}{\hbar} \sqrt{\frac{2m}{U_0}} (U_0 - E)\right)$ .

**Ответ:**  $D \approx \exp\left(-\frac{\pi l}{\hbar} \sqrt{\frac{2m}{U_0}} (U_0 - E)\right)$ .

## 6. СВОЙСТВА АТОМОВ

Квантовые числа, возникающие при решении волнового уравнения, служат для описания состояний квантовомеханической системы.

Состояние электрона в атоме определяется набором четырех квантовых чисел:  $n = 1, 2, 3, \dots, \infty$  – *главное квантовое число*;

$l = 0, 1, 2, \dots, (n - 1)$  – орбитальное квантовое число;  
 $m$  (или  $m_l$ ) =  $0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$  – магнитное квантовое число;  
 $s$  (или  $m_s$ ) =  $\pm 1/2$  – спиновое квантовое число (спин).

Электроны с разными спинами обозначаются стрелками, направленными вверх и вниз:  $\uparrow\downarrow$ .

Главное и орбитальное квантовые числа  $n$  и  $l$  определяют энергию электрона  $E$  в атоме или номер орбитали. Для атома водорода  $E = \frac{R\hbar}{n^2}$ , для атомов щелочных металлов  $E = \frac{R\hbar}{(n + \alpha_l)^2}$ , где  $\alpha_l$  – ридберговская поправка, которая зависит от  $l$ .

Атомная орбиталь является геометрическим образом одноэлектронной волновой функции. Она представляет собой область пространства вокруг ядра атома, в которой высока вероятность обнаружения электрона (обычно выбирают значение вероятности 90–95%). Это слово происходит от латинского «орбита» (путь, колея), но имеет другой смысл, не совпадающий с понятием траектории (пути) электрона вокруг атома, предложенным Н. Бором для планетарной модели атома. Контур атомной орбитали – это графическое отображение волновой функции, полученной при решении волнового уравнения для одного электрона.

Таким образом, каждому значению главного квантового числа отвечает определенное значение энергии электрона (энергетический уровень). Совокупность электронов в многоэлектронном атоме с одинаковыми значениями квантового числа  $n$  называется электронной оболочкой. В соответствии со значениями  $n$  оболочки обозначают большими буквами латинского алфавита (табл. 2):

Таблица 2

Значение $n$	1	2	3	4	5	6	7
Обозначение оболочки	<i>K</i>	<i>L</i>	<i>M</i>	<i>N</i>	<i>O</i>	<i>P</i>	<i>Q</i>

Величина  $T = -\frac{E}{\hbar}$  называется терм. Термы определяют энергетические уровни, т. е. частоты спектральных линий атома. Терм является положительным числом, учитывая, что энергии связанных состояний электрона в атоме отрицательны. Для атома водорода  $T = \frac{R}{n^2}$ , для атомов щелочных металлов  $T = \frac{R}{(n + \alpha_l)^2}$ .

Орбитальное квантовое число  $l$  определяет модуль момента импульса электрона:  $M_l = \hbar\sqrt{l(l+1)}$ .

Электроны с одинаковым значением  $l$  образуют энергетический подуровень. Энергетический подуровень – совокупность энергетических состояний электрона в атоме, характеризующихся одними и теми же значениями квантовых чисел  $n$  и  $l$ . Первый энергетический уровень имеет один подуровень, второй – два подуровня, третий – три подуровня и т. д. Кроме числовых значений  $l$  имеет буквенные обозначения (табл. 3):

Таблица 3

$l$	0	1	2	3	4	5	6
Обозначение подуровня	$s$	$p$	$d$	$f$	$g$	$h$	$i$

Орбитальное квантовое число характеризует форму орбиталей. Форма орбиталей сферическая,  $p$ -орбитали напоминают гантели,  $d$ - и  $f$ -орбитали имеют более сложную форму.

Таким образом, каждой орбитали отвечает определенная энергия. Обозначение орбитали включает номер энергетического уровня и букву, отвечающую соответствующему подуровню:  $1s, 3p, 4d$  и т. д. Для каждого энергетического уровня, начиная со второго, возможно существование трех равных по энергии  $p$ -орбиталей, расположенных в трех взаимно перпендикулярных направлениях. На каждом энергетическом уровне, начиная с третьего, имеется пять  $d$ -орбиталей, у которых более сложная четырехлепестковая форма. Начиная с четвертого энергетического уровня, появляются еще более сложные по форме  $f$ -орбитали; на каждом уровне их семь. Атомную орбиталь с распределенным по ней зарядом электрона нередко называют *электронным облаком*.

Магнитное квантовое число  $m$  определяет проекцию момента импульса электрона на выбранную ось:  $M_z = m\hbar$ . Магнитное квантовое число отвечает за ориентацию атомных орбиталей в пространстве.

Спиновое квантовое число  $s$  определяет модуль собственного момента импульса электрона:  $M_s = \hbar\sqrt{s(s+1)}$ .

$M_{sz} = s\hbar$  – проекция собственного момента импульса электрона на выбранную ось.

Полный момент импульса электрона складывается из орбитального и спинового моментов и определяется квантовым числом  $j = |l - s|, \dots, 0, \dots, |l + s|$ .

Результирующий механический момент *многоэлектронного атома* складывается из моментов импульсов всех электронов, входящих в атом. При этом возможны два варианта:

1) моменты  $M_l$  разных электронов связаны сильнее, чем моменты  $M_l$  и  $M_s$  одного электрона (связь Рёсселя – Саундерса или  $LS$ -связь). Такой вид связи встречается чаще всего. Состояние атома при этом описывается квантовыми числами:

$$L = |l_1 - l_2|, \dots, |l_1 + l_2|;$$

$$S = |s_1 - s_2|, \dots, |s_1 + s_2|;$$

$$J = |L - S|, \dots, |L + S|.$$

Тогда механические моменты атома равны:

$$M_L = \hbar\sqrt{L(L + 1)} - \text{орбитальный};$$

$$M_S = \hbar\sqrt{S(S + 1)} - \text{спиновый};$$

$$M_J = \hbar\sqrt{J(J + 1)} - \text{полный момент импульса};$$

2)  $M_l$  и  $M_s$  каждого электрона связаны сильнее, чем  $M_{l1}$  и  $M_{l2}$  разных электронов ( $jj$ -связь). Такой вид связи наблюдается у тяжелых атомов. При этом состояние системы описывается следующими квантовыми числами:

$$j_1 = |l_1 - s_1|, \dots, |l_1 + s_1|;$$

$$j_2 = |l_2 - s_2|, \dots, |l_2 + s_2|;$$

$$J = |j_1 - j_2|, \dots, |j_1 + j_2|.$$

Энергия атома является суммарной энергией электронов, входящих в атом, и зависит от взаимной ориентации  $M_l$  и  $M_s$ .

В случае нормальной связи терм такого атома записывается в виде  $^{2S+1}L_J$ , где  $L$  обозначается буквами  $S, P, D, F$  и т. д. в зависимости от значения  $L$ :  $S$  при  $L = 0$ ;  $P$  при  $L = 1$ ,  $D$  при  $L = 2$ ,  $F$  при  $L = 3$  и т. д.

Величина  $k = 2S + 1$  называется *мультиплетностью термина*. Мультиплетность равна числу возможных ориентаций в пространстве спина атома или молекулы. Мультиплетность определяет число подуровней, на которое может расщепляться уровень энергии вследствие спин-орбитального взаимодействия.

Магнитный момент связан с механическим через магнетон Бора.

*Магнетон Бора* – минимальное значение магнитного момента:  $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e c}$ .

Отношение магнитного момента к механическому называется *гиромагнитным соотношением*:  $\gamma = \frac{\mu}{M}$ .

Таким образом,

$$\mu_L = -\mu_B \sqrt{L(L+1)} = -\mu_B M_L,$$

$$\mu_S = -\mu_B \sqrt{S(S+1)} = -2\mu_B M_S,$$

$$\mu_J = -\mu_B \sqrt{J(J+1)} = -\mu_B g M_J,$$

где  $g$  – множитель Ланде:  $g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}$ .

Магнитный и механический моменты всегда направлены в противоположные стороны.

Из всех возможных состояний (разрешенных наборов квантовых чисел) с наибольшей вероятностью реализуется состояние с минимальной энергией. Оно называется *основным* и определяется *правилом Хунда*:

1) энергия будет минимальной, если из всех состояний выбрать те, при которых  $S$  будет максимальным, и из них то, при котором  $L$  также будет максимальным;

2) мультиплеты, образованные эквивалентными электронами, являются *правильными* (т. е. при увеличении  $J$  энергия возрастает), если заполнено не более половины подоболочки, и *обращенными* (т. е. с увеличением  $J$  энергия убывает), если заполнено более половины подоболочки.

При переходе атома из одного энергетического состояния в другое выполняется *правило отбора*:  $\Delta J = 0, \pm 1$  и  $\Delta L = \pm 1$ . Вероятность переходов, запрещенных правилами отбора, практически равна нулю.

## 6.1. Примеры решения задач

1. 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  $1s^2 2p^3 3d$ .

**Решение:** а) для валентного электрона при  $n = 4$  орбитальное квантовое число  $l$  может принимать значения  $l = 0, 1, 2, 3$ , тогда  $l_{\max} = 3$ , значит, для атома  $L_{\max} = 3$ .

Валентный электрон имеет спин  $s = 1/2$ , спиновое квантовое число данного атома  $S = s$ , тогда максимальное значение квантового числа полного механического момента  $J_{\max}$  будет равно  $J_{\max} = |L_{\max} + S| = 3 + 1/2 = 7/2$ .

Мультиплетность такого атома равна  $k = 2s + 1 = 2$ .

Терм будет иметь обозначение:  ${}^2F_{7/2}$ .

Полный механический момент атома  $M_J = \hbar\sqrt{J(J+1)}$ ; тогда для атома

$$\text{натрия } M_J = \hbar\sqrt{\frac{7}{2} \cdot \frac{9}{2}} = \frac{\hbar}{2}\sqrt{63};$$

б) конфигурация  $1s^22p3d$  означает, что для двух  $s$ -электронов  $n = 1, l = 0$ ;

для валентного  $p$ -электрона  $n = 2, l = 0, 1$ , тогда  $l_{1\max} = 1$ ;

для валентного  $d$ -электрона  $n = 3, l = 0, 1, 2$ , тогда  $l_{2\max} = 2$ .

Орбитальное квантовое число  $L$  для атома может принимать значения  $L = |l_1 - l_2|, \dots, |l_1 + l_2|$ ;  $L = 1, 2, 3$ , значит,  $L_{\max} = 3$ .

Для  $s$ -электронов суммарный спин равен нулю, для валентных электронов спин  $s_1 = s_2 = 1/2$ .

Спиновое квантовое число атома  $S = 1$ ;

квантовое число  $J_{\max} = |L_{\max} + S| = 4$ .

Мультиплетность атома  $k = 2S + 1 = 3$ .

Терм –  ${}^3F_4$ .

Полный механический момент атома  $M_J = \hbar\sqrt{4 \cdot 5} = \hbar\sqrt{20} = 2\hbar\sqrt{5}$ .

**Ответ:** а)  ${}^2F_{7/2}$ ;  $M_J = \frac{\hbar}{2}\sqrt{63}$ ; б)  ${}^3F_4$ ;  $M_J = 2\hbar\sqrt{5}$ .

2. Атом находится в состоянии, мультиплетность которого равна трем, а полный механический момент  $\hbar\sqrt{20}$ . Каким может быть соответствующее квантовое число  $L$ ?

**Решение.** По условию мультиплетность  $k = 2S + 1 = 3$ , значит,  $S = 1$ .

Если полный механический момент атома  $M_J = \hbar\sqrt{J(J+1)} = \hbar\sqrt{20}$ , то  $J = 4$ .

Поскольку квантовое число  $J$  может принимать значения от  $|L - S|$  до  $|L + S|$ , то  $L_{\min} + 1 = 4$ , тогда  $L_{\min} = 3$  и  $L_{\max} - 1 = 4$ , тогда  $L_{\max} = 5$ .

Таким образом, орбитальное квантовое число атома может принимать значения 3, 4, 5.

**Ответ:**  $L = 3, 4, 5$ .

3. Определить максимально возможный орбитальный механический момент атома в состоянии, мультиплетность которого равна пяти и кратность вырождения по  $J$  – семи. Написать спектральное обозначение соответствующего терма.

**Решение.** По условию мультиплетность  $k = 2S + 1 = 5$ , значит,  $S = 2$ .

Кратность вырождения по  $J$  – число возможных состояний с одинаковыми значениями  $J$ :

$$2J + 1 = 7, \text{ тогда } J = 3;$$

$$J = |L_{\max} - S|, \text{ откуда } L_{\max} = 5.$$

Найдем максимальный орбитальный механический момент:

$$M_{L_{\max}} = \hbar\sqrt{L_{\max}(L_{\max} + 1)} = \hbar\sqrt{5 \cdot 6} = \hbar\sqrt{30}.$$

Учитывая, что  $L_{\max} = 5$ ,  $k = 5$ , а  $J = 3$ , терм будет иметь обозначение:  ${}^5H_3$ .

**Ответ:**  $M_L = \hbar\sqrt{30}$ ;  ${}^5H_3$ .

4. Система состоит из  $d$ -электрона и атома в  ${}^2P_{3/2}$ -состоянии. Найти возможные спектральные термы этой системы.

**Решение.** Система представляет собой электрон и атом. Для  $d$ -электрона орбитальное и спиновое квантовые числа равны соответственно:  $l = 2$ ,  $s = 1/2$ .

Для атома  ${}^2P_{3/2}$ :  $L = 1$ ,  $S = 1/2$  (т. к.  $k = 2S + 1 = 2$ ).

Тогда для системы:

$$L = |l_1 - l_2|, \dots, |l_1 + l_2| = 1, 2, 3; S = |s_1 - s_2|, \dots, |s_1 + s_2| = 0, 1.$$

1) для  $S = 0$  возможные значения квантового числа полного механического момента:

$$J = |L - S|, \dots, |L + S| = 1, 2, 3.$$

Мультиплетность системы:  $k = 2S + 1 = 1$ .

Соответствующие термы будут иметь обозначения:  ${}^1P_1$ ;  ${}^1D_2$ ;  ${}^1F_3$ ;

2) для  $S = 1$  мультиплетность системы  $k = 2S + 1 = 3$ .

а) для  $L = 1$ :  $J = |L - S|, \dots, |L + S| = 0, 1, 2$ .

Обозначения термов:  ${}^3P_0$ ;  ${}^3P_1$ ;  ${}^3P_2$ ;

б) для  $L = 2$ :  $J = |L - S|, \dots, |L + S| = 1, 2, 3$ .

Обозначения термов:  ${}^3D_1$ ;  ${}^3D_2$ ;  ${}^3D_3$ ;

в) для  $L = 3$ :  $J = |L - S|, \dots, |L + S| = 2, 3, 4$ .

Обозначения термов:  ${}^3F_2$ ;  ${}^3F_3$ ;  ${}^3F_4$ .

**Ответ:**  ${}^1P_1$ ;  ${}^1D_2$ ;  ${}^1F_3$ ;  ${}^3P_0$ ;  ${}^3P_1$ ;  ${}^3P_2$ ;  ${}^3D_1$ ;  ${}^3D_2$ ;  ${}^3D_3$ ;  ${}^3F_2$ ;  ${}^3F_3$ ;  ${}^3F_4$ .

5. У атома какого элемента заполнены  $K$ -,  $L$ - и  $M$ -оболочка,  $4s$ -подоболочка и наполовину  $4p$ -подоболочка?

**Решение.** Заполненная  $K$ -оболочка содержит два  $s$ -электрона;  $L$ -оболочка – два  $s$ - и шесть  $p$ -электронов;  $M$ -оболочка – два  $s$ -, шесть  $p$ - и десять  $d$ -электронов. Заполненная  $4s$ -подоболочка содержит два электрона, и наполовину заполненная  $4p$ -подоболочка – три электрона.

Электронная конфигурация такого атома выглядит следующим образом:  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^3$ .

Таким образом, суммарное количество электронов в атоме равно тридцати трем:  $N_e = 2 + 2 + 6 + 2 + 6 + 10 + 2 + 3 = 33$ .

Количество электронов в атоме равно порядковому номеру элемента в таблице Менделеева.

Воспользовавшись таблицей, определяем, что атом под номером 33 – атом мышьяка.

**Ответ:** атом мышьяка.

## 6.2. Задачи для самостоятельного решения

1. Выписать спектральные обозначения термов атома водорода, электрон которого находится в состоянии с главным квантовым числом  $n = 3$ .

**Ответ:**  ${}^3S_{1/2}$ ;  ${}^3P_{1/2}$ ;  ${}^3P_{3/2}$ ;  ${}^3D_{3/2}$ ;  ${}^3D_{5/2}$ .

2. Сколько и какие значения квантового числа  $J$  может иметь атом в состоянии с квантовыми числами  $S$  и  $L$ , равными соответственно: а) 2 и 3; б) 3 и 3; в)  $5/2$  и 2?

**Ответ:** а)  $J = 1, 2, 3, 4, 5$ ; б)  $J = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6$ ; в)  $J = 1/2, 3/2, 5/2, 7/2, 9/2$ .

3. Найти возможные значения полных механических моментов атомов, находящихся в состояниях  ${}^4P$  и  ${}^5D$ .

**Ответ:** для состояния  ${}^4P$  –  $\hbar \frac{\sqrt{3}}{2}$ ,  $\hbar \frac{\sqrt{15}}{2}$ ,  $\hbar \frac{\sqrt{35}}{2}$ ; для состояния  ${}^5D$  –  $\hbar\sqrt{2}$ ,  $\hbar\sqrt{6}$ ,  $\hbar\sqrt{12}$ ,  $\hbar\sqrt{20}$ .

4. Известно, что в  $F$ - и  $D$ -состояниях число возможных значений квантового числа  $J$  одинаково и равно пяти. Определить спиновый механический момент в этих состояниях.

**Ответ:** для  $F$ -состояния  $M_S = \hbar\sqrt{6}$ ; для  $D$ -состояния  $M_S \geq \hbar\sqrt{6}$ .

5. Найти возможные мультиплетности  $k$  термов типа:

а)  ${}^kD_2$ ; б)  ${}^kP_{3/2}$ ; в)  ${}^kF_1$ .

**Ответ:** а) 1, 3, 5, 7, 9; б) 2, 4, 6; в) 5, 7, 9.

6. Выписать спектральные термы двухэлектронной системы, состоящей из одного  $p$ -электрона и одного  $d$ -электрона.

**Ответ:**  ${}^1P_1$ ;  ${}^1D_2$ ;  ${}^1F_3$ ;  ${}^3P_0$ ;  ${}^3P_1$ ;  ${}^3P_2$ ;  ${}^3D_1$ ;  ${}^3D_2$ ;  ${}^3D_3$ ;  ${}^3F_2$ ;  ${}^3F_3$ ;  ${}^3F_4$ .

7. Установить, какие из нижеперечисленных переходов запрещены правилами отбора:  ${}^2D_{3/2} \rightarrow {}^2P_{1/2}$ ;  ${}^3P_1 \rightarrow {}^2S_{1/2}$ ;  ${}^3F_3 \rightarrow {}^3P_2$ ;  ${}^4F_{7/2} \rightarrow {}^4D_{5/2}$ .

**Ответ:** Запрещены переходы  ${}^3P_1 \rightarrow {}^2S_{1/2}$  и  ${}^3F_3 \rightarrow {}^3P_2$ .

8. Найти кратность вырождения состояния  ${}^2P$ ,  ${}^3D$ , и  ${}^4F$  с максимально возможными полными механическими моментами.

**Ответ:** кратность вырождения по  $J$  равна соответственно 4, 7, 10.

9. Написать спектральное обозначение терма, кратность вырождения которого равна семи, а квантовые числа  $L$  и  $S$  связаны соотношением  $L = 3S$ .

**Ответ:**  ${}^3F_3$ .

## ЛИТЕРАТУРА

1. Большая советская энциклопедия. – М. : Советская энциклопедия. 1969–1978.
2. Детлаф, А. А. Курс физики / А. А. Детлаф, Б. М. Яворский. – М. : Высш. шк., 2002.
3. Иродов, И. Е. Задачи по общей физике / И. Е. Иродов. – М. : Наука, 1988.
4. Пономарев, Л. И. По ту сторону кванта / Л. И. Пономарев. – М. : Молодая гвардия, 1971.
5. Савельев, И. В. Курс общей физики. В 3 т. Т. 3 / И. В. Савельев. – М. : Наука, 1987.
6. Сандомирский, В. Б. Контактная разность потенциалов / В. Б. Сандомирский // Энциклопедия физики и техники [Электронный ресурс]. – Режим доступа : [http://femto.com.ua/articles/part\\_1/1734.html](http://femto.com.ua/articles/part_1/1734.html).
7. Ташлыкова-Бушкевич, И. И. Физика. В 2 ч. Ч. 2 / И. И. Ташлыкова-Бушкевич. – Минск : БГУИР, 2008.
8. Трофимова, Т. И. Курс физики / Т. И. Трофимова. – М. : Высш. шк., 1990.
9. Физическая энциклопедия. В 5 т. / Под ред. А. М. Прохорова. – М. : Советская энциклопедия, 1988–1999.
10. Физический энциклопедический словарь / Под ред. А. М. Прохорова. – М. : Советская энциклопедия, 1983.
11. Чертов, А. Г. Задачник по физике / А. Г. Чертов, А. А. Воробьев. – М. : Высш. шк., 1981.

*Учебное издание*

**Андрианова Елена Вилоровна**  
**Андрос Елена Васильевна**  
**Боброва Зоя Александровна и др.**

## **РЕШЕНИЕ ЗАДАЧ ПО КВАНТОВОЙ ФИЗИКЕ**

ПОСОБИЕ

Редактор *М. А. Зайцева*  
Корректор *Е. Н. Батурчик*  
Компьютерная правка, оригинал-макет *Е. Г. Бабичева*

Подписано в печать 05.06.2014. Формат 60x84 1/16. Бумага офсетная. Гарнитура «Таймс».  
Отпечатано на ризографе. Усл. печ. л. 4,07. Уч.-изд. л. 4,0. Тираж 200 экз. Заказ 468.

Издатель и полиграфическое исполнение: учреждение образования  
«Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники».  
Свидетельство о государственной регистрации издателя, изготовителя,  
распространителя печатных изданий №1/238 от 24.03.2014,  
№2/113 от 07.04.2014, №3/615 от 07.04.2014.  
ЛП №02330/264 от 14.04.2014.  
2200013, Минск, П. Бровки, 6