

Л.П. Авакянц, С.В. Колесников, А.М. Салецкий

ВВЕДЕНИЕ В КВАНТОВУЮ ФИЗИКУ. МЕТОДИКА РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ

Рекомендовано Федеральным учебно-методическим объединением в системе высшего образования по укрупненной группе специальностей и направлений подготовки 03.00.00 – «Физика и астрономия» в качестве учебного пособия для обучающихся по основным образовательным программам высшего образования уровней бакалавриата и магистратуры по направлению подготовки 03.03.02 – Физика и 03.04.02 – Физика



Москва
Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова
2018

УДК 530.145
ББК 22.314

Л. П. Авакянц, С.В. Колесников, А.М. Салецкий.
Введение в квантовую физику. Методика решения задач / Учебное пособие. М.: Физический факультет МГУ, 2018. 400 с.
ISBN 978-5-9905983-3-1

Учебное пособие по решению задач курса «Введение в квантовую физику» написано на основании многолетнего опыта проведения занятий по физике на физическом факультете МГУ имени М.В. Ломоносова и входит в серию «Университетский курс общей физики»

Пособие разбито по главам, каждая из которых включает в себя теоретический материал, задачи с решениями, короткие задачи и задачи для самостоятельного решения.

Настоящее пособие предназначено для студентов высших учебных заведений и имеет целью помочь им овладеть основными методами и приобрести навыки решения задач курса «Введение в квантовую физику».

Рецензент – д.ф.-м.н., профессор Г.С. Плотников

Печатается по рекомендации Ученого совета физического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова

Учебное издание
АВАКЯНЦ Л.П., КОЛЕСНИКОВ С.В., САЛЕЦКИЙ А.М.

**ВВЕДЕНИЕ В КВАНТОВУЮ ФИЗИКУ.
МЕТОДИКА РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ**

Подписано в печать 12.11.2018.
Формат 60х90/16. Объем 25 п.л. Тираж 150 экз.
Заказ №

Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова
119991, Москва, Ленинские горы, д.1, стр. 2

ISBN 978-5-9905983-3-1

© Физический факультет МГУ
им. М.В. Ломоносова, 2018 г.
© Коллектив авторов, 2018 г.

УНИВЕРСИТЕТСКИЙ КУРС ОБЩЕЙ ФИЗИКИ

(Предисловие редактора инновационного учебно-методического комплекса)

В настоящее время физика все более глубоко проникает во все области современной науки и техники, появляются ее новые отрасли. В связи с этим возникает проблема подготовки квалифицированных кадров ученых-физиков. Существенную роль в такой подготовке играет преподавание общего курса физики. Для решения этой проблемы на физическом факультете МГУ им. М.В. Ломоносова создан инновационный учебно-методический комплекс (ИУМК) «Университетский курс общей физики», обеспечивающий организационную и содержательную целостность системы подготовки, методов и средств обучения общей физике.

ИУМК «Университетский курс общей физики» создан на основе многолетнего опыта преподавания физики студентам физического факультета Московского университета. Курс охватывает все разделы общей физики. Отличительной особенностью данного курса является то, что в нем в методическом отношении осуществлено единство основных форм обучения физике: лекции, лабораторные работы и семинары. В системе университетского образования теоретический материал излагается в основном в лекционных курсах, а умение решать задачи отрабатывается на семинарских занятиях. Развитие навыков эксперимента и анализа его результатов происходит в процессе занятий в общем физическом практикуме. В связи с этим, каждый раздел курса состоит из шести пособий: «Лекции», «Лекционный эксперимент», «Лабораторный практикум», «Разработка семинарских занятий», «Методика решения задач» и «Сборник задач».

Каждая глава пособия «Лекции» содержит материал базового уровня, соответствующего программе курса, и отражает современные тенденции и технологии физического образования. Цель авторов данного курса – представить общую физику в виде, используемом активно работающими в науке физиками.

Лекции по каждой теме сопровождаются демонстрацией основных физических экспериментов, описание которых представлено в пособии «Лекционный эксперимент». Большая часть описанных экспериментов разработана на кафедре общей физики физиче-

ского факультета им. М.В. Ломоносова. В тексте пособия имеется также ряд ссылок на авторские свидетельства на изобретения в области лекционных экспериментов, полученные сотрудниками кафедры. Описание классических опытов и экспериментальных установок, представленное в пособии «Лекционный эксперимент», увеличивает ценность и привлекательность курса.

Для установления единого уровня сложности задач и широты охвата материала на семинарах служит пособие «Разработка семинарских занятий», предназначенное для преподавателя. В данном пособии описаны основные принципы проведения семинара. Рассматривается порядок подачи учебного материала, включающий проверку теоретической подготовки студента, обсуждение метода решения задачи, анализ физического смысла результата, разбор характерных ошибок.

Все формы занятий предполагают значительную самостоятельную внеаудиторную работу студентов. Пособием, позволяющим самостоятельно развивать умение решать физические задачи, является «Методика решения задач». Весь материал пособия разбит на главы. Разбор задач всех глав проводится по единой схеме, причем каждую главу можно прорабатывать независимо от других. Пособие содержит также задачи с решениями повышенной сложности для студентов, желающих более глубоко освоить курс общей физики. Для самостоятельной работы студентов предназначен «Сборник задач», в котором представлены наиболее характерные и типичные задачи.

Неотъемлемой частью курса общей физики служит лабораторный практикум. Материалы пособия «Лабораторный практикум» достаточны для самостоятельной подготовки к выполнению работ. В связи с этим в пособии имеется как общее теоретическое введение, так и более подробное изложение теории к каждой лабораторной работе. Кроме того, для каждой работы сформулированы цель и идея эксперимента, дано описание установки и подробное изложение последовательности проведения эксперимента и обработки результатов. Представленные в пособии лабораторные работы являются результатом работы нескольких поколений преподавателей кафедры общей физики физического факультета МГУ им. М.В. Ломоносова. Первые лабораторные работы составили содержание двухтомника «Физический практикум» под редакцией В.И. Ивероновой, вышедшего в свет в 1967 г. В последние годы разработаны и введены в действие новые современные лабораторные работы

с использованием современных экспериментальных методов исследования физических процессов. Более 50% лабораторных работ являются автоматизированными с управлением компьютером. В каждом семестре студент выполняет 12 лабораторных работ, причем 60-70% являются обязательными для всех студентов, а остальные распределяются с учетом их пожеланий.

Для повышения эффективности усвоения сути изучаемых физических явлений и законов в тематических лабораториях без расхода времени на ознакомление со стандартной технологией измерений в ИУМК введен раздел «Введение в технику эксперимента», состоящий из двух частей: «Лекции» и «Практикум». Лекции посвящены краткому изложению общих принципов проведения физических измерений, теории ошибок и статистической оценки достоверности полученных результатов, а также основных требований к оформлению полученной информации в виде графиков, номограмм и таблиц. В практической части представлены описания лабораторных работ начального цикла, в которых на сравнительно простых физических явлениях студент знакомится с наиболее распространенными приборами, с методами измерений и с правильной обработкой их результатов, основами анализа погрешностей измерений и правилами представления результатов с учетом его точности.

Курс предназначен не только для физиков, но может быть полезен для будущих инженеров, химиков и биологов.

Все пожелания и замечания по пособиям курса будут с благодарностью приняты и рассмотрены на кафедре общей физики физического факультета МГУ им. М.В. Ломоносова.

А.М. Салецкий

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие.....	8
Глава 1. Излучение абсолютно черного тела.....	9
1.1. Теоретический материал.....	9
1.2. Задачи с решениями.....	11
1.3. Короткие задачи	20
1.3. Задачи для самостоятельного решения	23
1.4. Список литературы	25
Глава 2. Корпускулярные свойства излучения	26
2.1. Теоретический материал.....	48
2.2. Задачи с решениями	29
2.3. Короткие задачи	45
2.3. Задачи для самостоятельного решения	47
2.4. Список литературы	50
Глава 3. Волна Де-Бройля. Соотношения неопределенностей.....	51
3.1. Теоретический материал.....	51
3.2. Задачи с решениями.....	52
3.3. Короткие задачи	65
3.4. Задачи для самостоятельного решения	67
3.4. Список литературы	70
Глава 4. Простейшие модели атома водорода	71
4.1. Теоретический материал.....	71
4.2. Задачи с решениями.....	74
4.3. Короткие задачи	95
4.3. Задачи для самостоятельного решения	99
4.4. Список литературы	102
Глава 5. Основные понятия квантовой механики	103
5.1. Теоретический материал.....	103
5.2. Задачи с решениями	109
5.3. Короткие задачи	132
5.3. Задачи для самостоятельного решения	135
Глава 6. Уравнение Шредингера.....	139
6.1. Теоретическое введение	139
6.2. Задачи с решениями.....	142
6.3. Короткие задачи	189

6.4. Задачи для самостоятельного решения	195
6.5. Список литературы	205
Глава 7. Спин электрона	208
7.1. Теоретический материал.....	208
7.2. Задачи с решениями.....	210
7.3. Короткие задачи	226
7.4. Задачи для самостоятельного решения	229
7.5. Список литературы	233
Глава 8. Ансамбли невзаимодействующих квантовых частиц.	234
8.1. Теоретический материал.....	234
8.2. Задачи с решениями.....	235
8.3. Короткие задачи	256
8.4. Задачи для самостоятельного решения	259
8.5. Список литературы	262
Глава 9. Квазичастицы в твердом теле	263
9.1. Теоретический материал.....	263
9.2. Задачи с решениями.....	267
9.3. Короткие задачи	296
9.4. Задачи для самостоятельного решения	302
9.5. Список литературы	306
Глава 10. Электроны и дырки в полупроводниках.....	307
10.1. Теоретический материал.....	307
10.2. Задачи с решениями.....	311
10.3. Короткие задачи	332
10.4. Задачи для самостоятельного решения	235
10.5. Список литературы	338
Глава 11. Излучение света.....	339
11.1. Теоретический материал.....	339
11.2. Задачи с решениями.....	340
11.3. Короткие задачи	359
11.4. Задачи для самостоятельного решения	361
11.5. Литература	363
Глава 12. Низкотемпературные наноструктуры.....	364
12.1. Теоретический материал.....	364
12.2. Задачи с решениями.....	366
12.3. Короткие задачи	393
12.4. Задачи для самостоятельного решения	396
12.5. Литература	398
Приложение	399

ПРЕДИСЛОВИЕ

Предлагаемое учебное пособие является составной частью серии учебно-методических разработок кафедры общей физики физического факультета МГУ им. М.В. Ломоносова «Университетский курс общей физики».

Тематически книгу можно разделить на три части. Главы 1–4 посвящены некоторым аспектам так называемой «старой квантовой теории», которая развивалась в период с 1900 по 1924 год. Главы 5–7 посвящены основным понятиям современной квантовой механики материальной точки. Главы 8–12 посвящены применению законов квантовой механики к многочастичным системам.

Каждая глава включает в себя пять разделов: теоретический материал, задачи с решениями, короткие задачи, задачи для самостоятельного решения, а также список литературы. Теоретический материал, представленный в начале каждой главы, содержит основные понятия, определения и формулы, необходимые для решения задач. Доказательство большей части формул теоретического материала сформулировано в виде задач и приведено в разделе «задачи с решениями». Особенностью курса квантовой физики является сравнительно небольшое число простых задач, не требующих многочасовых математических выкладок.

Преподаватели, ведущие занятия по курсу «Введение в квантовую физику» на физическом факультете МГУ имени М.В. Ломоносова, в течение нескольких лет использовали отдельные материалы пособия и высказали свои замечания и предложения, которые были учтены авторами. Авторы выражают глубокую благодарность П.А. Андрееву, А.Л. Клавсюку, И.А. Колмычек, О.Г. Косаревой, С.Е. Свяховскому и К.М. Цысарь за плодотворные дискуссии и ценные замечания, высказанные в процессе написания данного учебного пособия.

Особую признательность авторы выражают доцентам А.В. Быкову и М.В. Семенову за ценные замечания и редакционные правки в ходе подготовки рукописи к изданию.

ГЛАВА 1 ИЗЛУЧЕНИЕ АБСОЛЮТНО ЧЁРНОГО ТЕЛА

1.1. Теоретический материал

1. Абсолютно черное тело. Тело, поглощающее все падающее на него излучение, называется *абсолютно черным*. Такое тело может быть осуществлено в виде полости с хорошо поглощающими внутренними стенками, снабженной маленьким отверстием (см. рис. 1.1). Всякий луч, падающий извне в это отверстие, мог бы снова попасть в него и выйти наружу, лишь претерпев многократное отражение от стенок полости. Поэтому при достаточно малых размерах отверстия полость будет поглощать практически все падающее на отверстие излучение, и таким образом отверстие будет представлять собой абсолютно черное тело.



Рис. 1.1. Сферическая полость с малым отверстием.

2. Спектральная плотность энергии. В случае отсутствия внешнего излучения, электромагнитное излучение внутри полости однородно и изотропно, а объемная плотность его энергии ρ зависит только от температуры. Однако распределение энергии излучения по частотам неоднородно. Объемная плотность энергии $d\rho$ электромагнитного излучения в интервале $(\omega, \omega + d\omega)$, отнесенная к ширине этого интервала $d\omega$, называется *спектральной плотностью энергии*

$$\rho_{\omega} = \frac{d\rho}{d\omega}.$$

Аналогично можно определить спектральную плотность энергии ρ_{λ} :

$$\rho_{\lambda} = \frac{d\rho}{d\lambda}.$$

Очевидно, что величины ρ_{ω} и ρ_{λ} связаны друг с другом

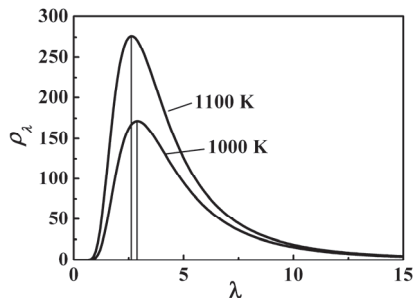


Рис. 1.2. Зависимость спектральной плотности (в $\text{Дж}\cdot\text{м}^{-4}$) от длины волны (в мкм) при температурах 1000 К и 1100 К.

соотношением

$$\rho = \int_0^{\infty} \rho_{\omega} d\omega = \int_0^{\infty} \rho_{\lambda} d\lambda .$$

Зависимость спектральной плотности энергии равновесного теплового излучения описывается формулой Планка:

$$\rho_{\omega}(T) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1} \quad \left[\text{Дж} \cdot \text{с} \cdot \text{м}^{-3} \right]$$

или

$$\rho_{\lambda}(T) = \frac{16\pi^2 c \hbar}{\lambda^5} \frac{1}{\exp\left(\frac{2\pi\hbar c}{\lambda kT}\right) - 1} \quad \left[\text{Дж} \cdot \text{м}^{-4} \right],$$

где $\hbar = 1,05 \cdot 10^{-34}$ Дж·с – приведенная постоянная Планка, а $k = 1,38 \cdot 10^{-23}$ Дж·К⁻¹ – постоянная Больцмана. Зависимости $\rho_{\lambda}(T)$ для двух различных температур представлены на рис. 1.2. Положение максимума спектральной плотности и площадь под кривой зависят только от температуры:

$$\lambda_{\max} T = b \quad (\text{закон смещения Вина}),$$

$$\text{где } b = 0,2014 \frac{2\pi\hbar c}{k} = 2,897 \cdot 10^{-3} \text{ м} \cdot \text{К},$$

$$\rho = \alpha T^4 \quad (\text{закон Стефана–Больцмана}),$$

где $\alpha = \frac{\pi^2 k^4}{15\hbar^3 c^3} = 7,57 \cdot 10^{-16}$ Дж·м⁻³·К⁻⁴ – объемная постоянная Стефана–Больцмана.

3. Испускательная способность. По определению, *испускательной способностью* S тела называется энергия, излучаемая с единицы поверхности тела в единицу времени. Испускательная способность абсолютно черного тела и объемная плотность энергии электромагнитного излучения связаны простым соотношением:

$$S = \frac{c}{4} \rho = \sigma T^4 \quad \left[\text{Вт} \cdot \text{м}^{-2} \right],$$

где $\sigma = \frac{\pi^2 k^4}{60\hbar^3 c^2} = 5,67 \cdot 10^{-8}$ Вт·м⁻²·К⁻⁴ – поверхностная постоянная Стефана–Больцмана.

4. Фотоны. Плоскую монохроматическую электромагнитную волну с частотой ω и волновым вектором \mathbf{k} можно представить в виде пучка частиц, *фотонов*, с энергией $E = \hbar\omega$ и импульсом $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$. Масса фотона $m = 0$, спин $s = 1$.

1.2. Задачи с решениями

Задача 1.2.1. Считая, что электромагнитное поле находится в резонаторе в виде куба, определить число различных мод нормальных колебаний электромагнитного поля на единицу объема в интервале частот $(\omega, \omega + d\omega)$. Получить формулу для спектральной плотности энергии $\rho_\omega(T)$ равновесного электромагнитного излучения.

Решение

Как известно из курса «Электричество и магнетизм», в резонаторе в виде куба с ребром L установятся стоячие электромагнитные волны

$$E(x, y, z, t) = E_0 \sin(k_x x) \sin(k_y y) \sin(k_z z) \cos(\omega t + \delta),$$

причем на длине L укладывается целое число полувольт, что эквивалентно условиям:

$$k_x L = \pi n_x, \quad k_y L = \pi n_y, \quad k_z L = \pi n_z, \quad (1.1)$$

где n_x , n_y и n_z – натуральные числа. Подставляя волновые числа k_x , k_y и k_z из (1.1) в закон дисперсии электромагнитных волн $\omega = ck$, получим

$$\omega = c \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2} = \frac{c\pi}{L} \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2} = \frac{c\pi}{L} n,$$

где n – модуль вектора \mathbf{n} с координатами $\{n_x, n_y, n_z\}$. Если по осям декартовой системы координат откладывать координаты вектора \mathbf{n} , то постоянному значению частоты ω будет соответствовать сфера радиусом n (см. рис 1.3), а интервалу частот $(\omega, \omega + d\omega)$ – сферический слой толщины $dn = Ld\omega/\pi c$. Поскольку числа n_x , n_y и n_z принимают только положительные значения, число различных мод нормальных колебаний электромагнитного

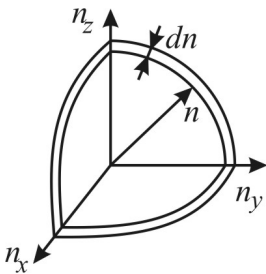


Рис. 1.3. Одна восьмая часть сферического слоя толщиной dn .

поля dN_s с частотами в интервале $(\omega, \omega + d\omega)$, равно объему одной восьмой части этого сферического слоя:

$$dN_s = 2 \cdot \frac{1}{8} \cdot 4\pi n^2 dn = L^3 \frac{\omega^2 d\omega}{\pi^2 c^3}.$$

Дополнительный множитель 2 учитывает число независимых поляризаций электромагнитных волн в вакууме. В расчете на единицу объема число различных мод нормальных колебаний электромагнитного поля равно

$$dn_s = \frac{dN_s}{L^3} = \frac{\omega^2 d\omega}{\pi^2 c^3}.$$

Каждой моде нормальных колебаний можно поставить в соответствие гармонический осциллятор. Поэтому по теореме о равномерном распределении энергии по степеням свободы среднее значение энергии каждой моды колебаний равно $\bar{E} = kT$. Тогда для спектральной плотности энергии равновесного электромагнитного излучения получаем формулу

$$\rho_\omega(T) = \frac{dn_s}{d\omega} \bar{E} = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} kT. \quad (1.2)$$

Полученная формула известна как закон Рэлея–Джинса.

Замечание. Стоит обратить внимание на несостоятельность классической теории излучения абсолютно чёрного тела. Видно, что согласно формуле (1.2) спектральная плотность энергии $\rho_\omega(T)$ растет пропорционально квадрату частоты, поэтому интеграл $\int_0^\infty \rho_\omega(T) d\omega \rightarrow \infty$ при любой температуре $T > 0$, что противоречит закону Стефана–Больцмана. Неограниченное возрастание спектральной плотности энергии получило название *ультрафиолетовой катастрофы*.

Ответ:
$$\rho_\omega(T) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} kT.$$

Задача 1.2.2. Согласно гипотезе Планка, энергия осциллятора определяется соотношением $E_n = n\hbar\omega$, где $n = 0, 1, 2, \dots$. Предпо-

лагая, что распределение осцилляторов по энергиям подчиняется статистике Гиббса, определить среднюю энергию \bar{E} осциллятора при температуре T . Получить формулу Планка.

Решение

Согласно каноническому распределению Гиббса, вероятность нахождения осциллятора в состоянии с энергией E_n равна

$$P_n = \frac{1}{\zeta} \exp\left(-\frac{E_n}{kT}\right),$$

где ζ – статистическая сумма

$$\zeta = \sum_n \exp\left(-\frac{E_n}{kT}\right).$$

Статистическую сумму гармонического осциллятора легко вычислить, вспомнив формулу для суммы геометрической прогрессии. Введем для удобства переменную $x \equiv \hbar\omega/kT$. Тогда

$$\zeta = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-nx} = 1 + e^{-x} + e^{-2x} + \dots = \frac{1}{1 - e^{-x}},$$

и среднее значение энергии гармонического осциллятора равно

$$\begin{aligned} \bar{E} &= \sum_{n=0}^{\infty} E_n P_n = \frac{\hbar\omega}{\zeta} \sum_{n=0}^{\infty} n e^{-nx} = -\frac{\hbar\omega}{\zeta} \frac{d}{dx} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-nx} = -\hbar\omega \frac{d \ln \zeta}{dx} = \\ &= \hbar\omega \frac{d}{dx} \ln(1 - e^{-x}) = \hbar\omega \frac{e^{-x}}{1 - e^{-x}} = \frac{\hbar\omega}{e^x - 1} = \frac{\hbar\omega}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1}. \end{aligned} \quad (1.3)$$

Обратим внимание на то, что выражение (1.3) для средней энергии гармонического осциллятора переходит в классическое выражение $\bar{E} = kT$ в пределе $\hbar\omega \ll kT$. Используя полученное значение средней энергии \bar{E} вместо классического, получим формулу Планка:

$$\rho_{\omega}(T) = \frac{dn_s}{d\omega} \bar{E} = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1}.$$

Ответ:
$$\bar{E} = \frac{\hbar\omega}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1}.$$

Задача 1.2.3. Исходя из формулы Планка для спектральной плотности $\rho_\omega(T)$, получить выражение для спектральной плотности $\rho_\lambda(T)$.

Решение

Как известно, частота ω электромагнитной волны связана с её длиной λ соотношением $\omega = 2\pi c/\lambda$. Подставляя его в формулу Планка, получим

$$\rho_\omega(T) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2c^3} \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1} = \frac{8\pi\hbar}{\lambda^3} \frac{1}{\exp\left(\frac{2\pi\hbar c}{\lambda kT}\right) - 1}.$$

Обратим особое внимание на то, что это не $\rho_\lambda(T)$, а по-прежнему $\rho_\omega(T)$, в котором ω выражено через λ .

Чтобы получить правильное выражение для спектральной плотности $\rho_\lambda(T)$, воспользуемся соотношением

$$\int_0^\infty \rho_\omega(T) d\omega = \int_0^\infty \rho_\lambda(T) d\lambda.$$

Получим:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \rho_\omega(T) d\omega &= \int_\infty^0 \frac{8\pi\hbar}{\lambda^3} \frac{1}{\exp\left(\frac{2\pi\hbar c}{\lambda kT}\right) - 1} \left(-\frac{2\pi c}{\lambda^2}\right) d\lambda = \\ &= \int_0^\infty \frac{16\pi^2c\hbar}{\lambda^5} \frac{1}{\exp\left(\frac{2\pi\hbar c}{\lambda kT}\right) - 1} d\lambda = \int_0^\infty \rho_\lambda(T) d\lambda, \end{aligned}$$

тогда

$$\rho_\lambda(T) = \frac{16\pi^2c\hbar}{\lambda^5} \frac{1}{\exp\left(\frac{2\pi\hbar c}{\lambda kT}\right) - 1}. \quad (1.4)$$

Ответ:
$$\rho_\lambda(T) = \frac{16\pi^2c\hbar}{\lambda^5} \frac{1}{\exp\left(\frac{2\pi\hbar c}{\lambda kT}\right) - 1}.$$

Задача 1.2.4. Исходя из формулы Планка для спектральной плотности энергии $\rho_\lambda(T)$, получить связь между длиной волны λ_{\max} , при которой спектральная плотность $\rho_\lambda(T)$ максимальна, и температурой абсолютно черного тела.

Решение

Чтобы найти λ_{\max} приравняем к нулю первую производную функции $\rho_\lambda(T)$ (1.4) по λ :

$$\frac{d\rho_\lambda}{d\lambda} = -\frac{5\rho_\lambda}{\lambda} - \frac{\rho_\lambda}{\exp\left(\frac{2\pi\hbar c}{\lambda kT}\right) - 1} \exp\left(\frac{2\pi\hbar c}{\lambda kT}\right) \left[-\frac{2\pi\hbar c}{\lambda^2 kT} \right] = 0. \quad (1.5)$$

Делая замену переменных:

$$x \equiv \frac{2\pi\hbar c}{\lambda kT},$$

получим из (1.5) трансцендентное уравнение:

$$x = 5(1 - e^{-x}). \quad (1.6)$$

Это уравнение можно решить итерационным методом. Для этого заметим, что если $x \approx 5$, то в правой части уравнения (1.6) слагаемое $-e^{-x}$ дает лишь малую поправку по сравнению с единицей. Поэтому в качестве первого приближения мы можем взять значение

$$x_1 = 5.$$

Подставляя это значение в правую часть уравнения (1.6), найдем второе приближение:

$$x_2 = 5(1 - e^{-x_1}) = 5(1 - e^{-5}) = 4,96631.$$

Подставляя x_2 в правую часть уравнения (1.6), найдем x_3 и т.д. Описанная процедура быстро сходится. И уже через несколько итераций мы приходим к окончательному значению

$$x = 4,965114 \approx \frac{1}{0,2014}.$$

Возвращаясь от переменной x к λ , получим закон смещения Вина

$$\lambda_{\max} T = 0,2014 \frac{2\pi\hbar c}{k},$$

где $0,2014 \frac{2\pi\hbar c}{k} = 2,897 \cdot 10^{-3} \text{ м} \cdot \text{К}$ – постоянная Вина.

Замечание. Запись постоянной Вина в форме $0,2014 \frac{2\pi\hbar c}{k}$ кажется нам более удобной для запоминания, поскольку в выражение $2\pi\hbar c/k = hc/k$ входят только фундаментальные константы физики, а множитель $0,2014$ ассоциируется, например, с зимней олимпиадой в Сочи.

Ответ: $\lambda_{\max} T = 0,2014 \frac{2\pi\hbar c}{k}$.

Задача 1.2.5. Исходя из формулы Планка для спектральной плотности энергии $\rho_{\omega}(T)$ равновесного электромагнитного излучения, получить связь между объемной плотностью электромагнитного излучения ρ и температурой T .

Решение

Для нахождения объемной плотности электромагнитного излучения ρ необходимо вычислить интеграл:

$$\rho = \int_0^{\infty} \rho_{\omega}(T) d\omega = \int_0^{\infty} \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1} d\omega.$$

Сделаем замену переменных:

$$x \equiv \frac{\hbar\omega}{kT},$$

тогда

$$\rho = \frac{k^4}{\pi^2 \hbar^3 c^3} T^4 \int_0^{\infty} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = \alpha T^4. \quad (1.7)$$

Мы получили закон Стефана–Больцмана. Константа α называется объемной постоянной Стефана–Больцмана. Для её вычисления воспользуемся табличным значением интеграла

$$I = \int_0^{\infty} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = \frac{\pi^4}{15}.$$

Поэтому объемная постоянная Стефана–Больцмана равна

$$\alpha = \frac{\pi^2 k^4}{15 \hbar^3 c^3} = 7,57 \cdot 10^{-16} \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-3} \cdot \text{К}^{-4}.$$

Замечание. Поскольку интеграл I будет использоваться в дальнейшем, скажем несколько слов о том, как его можно вычислить. Представим множитель $[e^x - 1]^{-1}$ в виде суммы геометрической прогрессии:

$$\frac{1}{e^x - 1} = e^{-x} \frac{1}{1 - e^{-x}} = e^{-x} (1 + e^{-x} + e^{-2x} + \dots) = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-nx}.$$

Тогда

$$I = \int_0^{\infty} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^{\infty} x^3 e^{-nx} dx = 6 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^4}. \quad (1.8)$$

Сумму входящего в (1.8) ряда можно вычислить, например, используя свойства рядов Фурье (см. [2], Глава 50, §5). Заметим, что числовой ряд быстро сходится и его сумму легко оценить, используя всего несколько первых членов. Например, сумма всего двух первых членов дает значение

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^4} \approx 1 + \frac{1}{16} = 1,0625,$$

близкое к точному значению

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^4} = \frac{\pi^4}{90} \approx 1,0823.$$

Ответ: $\rho = \frac{\pi^2 k^4}{15 \hbar^3 c^3} T^4.$

Задача 1.2.6. Вычислить испускательную способность S абсолютно черного тела.

Решение

По определению, испускательной способностью S тела называется энергия, излучаемая с единицы поверхности тела в единицу времени. В качестве модели абсолютно черного тела рассмотрим полость с малым отверстием, изображенную на рис. 1.1. Для удобства введем угловую плотность энергии $\rho_{\Omega} = d\rho/d\Omega$, где $d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi$ – элементарный телесный угол. Поскольку излучение внутри полости абсолютно черного тела

изотропно, то $\rho_\Omega = \rho/4\pi$. Найдем плотность потока энергии, проходящей через участок отверстия площадью Σ , если электромагнитное излучение падает на него под углом θ (см. рис. 1.4)

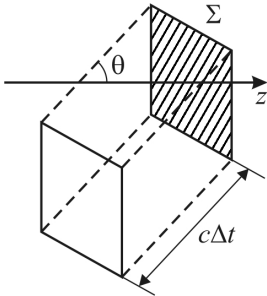


Рис. 1.4. Излучение падает на участок поверхности под углом θ .

$$S_{\theta,\varphi} = \frac{\Delta E}{\Sigma \cdot \Delta t} = \frac{\rho_\Omega \cdot \Sigma \cdot c \Delta t \cos \theta}{\Sigma \cdot \Delta t} = c \rho_\Omega \cos \theta,$$

где ΔE – энергия, проходящая через отверстие за время Δt в направлении (θ, φ) . Чтобы получить полный поток энергии через отверстие необходимо проинтегрировать $S_{\theta,\varphi}$ по половине полного телесного угла (нас интересует только излучение, выходящее из полости)

$$S = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi/2} S_{\theta,\varphi} \sin \theta d\theta = 2\pi c \rho_\Omega \int_0^{\pi/2} \cos \theta \sin \theta d\theta = \pi c \rho_\Omega = \frac{c}{4} \rho. \quad (1.9)$$

Подставляя в (1.9) выражение (1.7) для объемной плотности энергии, найденное в задаче 1.2.5, получим:

$$S = \frac{c}{4} \rho = \frac{\pi^2 k^4}{60 \hbar^3 c^2} T^4 = \sigma T^4.$$

Это другая форма записи закона Стефана–Больцмана. Постоянная

$$\sigma = \frac{\pi^2 k^4}{60 \hbar^3 c^2} = 5,67 \cdot 10^{-8} \text{ Вт} \cdot \text{м}^{-2} \cdot \text{К}^{-4}$$

называется поверхностной постоянной Стефана–Больцмана.

Ответ: $S = \frac{\pi^2 k^4}{60 \hbar^3 c^2} T^4.$

Задача 1.2.7. Оценить число n фотонов равновесного электромагнитного излучения в единице объема при комнатной температуре.

Решение

Объемная плотность энергии электромагнитного излучения равна

$$\rho = \int_0^{\infty} \rho_{\omega}(T) d\omega = \int_0^{\infty} \frac{\hbar \omega^3}{\pi^2 c^3} \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar \omega}{kT}\right) - 1} d\omega. \quad (1.10)$$

С другой стороны, если мы будем говорить об электромагнитном излучении, как о потоке фотонов с энергиями $\hbar\omega$, то объемную плотность энергии можно представить в виде

$$\rho = \int_0^{\infty} \hbar \omega \cdot n_{\omega} d\omega, \quad (1.11)$$

где n_{ω} – концентрация фотонов с частотами в интервале $(\omega, \omega + d\omega)$. Сравнивая выражения (1.10) и (1.11) для плотности энергии ρ , видим, что

$$n_{\omega} = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar \omega}{kT}\right) - 1}. \quad (1.12)$$

Полная концентрация фотонов равновесного электромагнитного излучения находится интегрированием выражения (1.12) по всем возможным частотам:

$$n = \int_0^{\infty} n_{\omega} d\omega = \frac{1}{\pi^2 c^3} \int_0^{\infty} \frac{\omega^2 d\omega}{\exp\left(\frac{\hbar \omega}{kT}\right) - 1} = \frac{k^3 T^3}{\pi^2 \hbar^3 c^3} \int_0^{\infty} \frac{x^2 dx}{e^x - 1}. \quad (1.13)$$

При интегрировании мы сделали замену переменных: $x \equiv \hbar\omega/kT$. Входящий в (1.13) интеграл можно свести к числовому ряду способом, описанным в замечании к задаче 1.2.5:

$$\int_0^{\infty} \frac{x^2 dx}{e^x - 1} = \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^{\infty} x^2 e^{-nx} dx = 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^3}.$$

Сумма обратных кубов натуральных чисел не выражается через степени π , она равна

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^3} \approx 1,202$$

и называется числом Апері.

В результате получим

$$n = \left(\frac{k}{\hbar c}\right)^3 \frac{2,404}{\pi^2} T^3.$$

Например, при комнатной температуре $T = 300$ К концентрация фотонов равна $n = 5,5 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-3}$.

$$\text{Ответ: } n = \left(\frac{k}{\hbar c} \right)^3 \frac{2,404}{\pi^2} T^3 = 5,5 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-3}.$$

1.3. Короткие задачи

Задача 1.3.1. Используя формулу Планка для спектральной плотности энергии $\rho_\omega(T)$ равновесного электромагнитного излучения, получить асимптотическую зависимость спектральной плотности энергии при $\hbar\omega \ll kT$ (закон Рэлея–Джинса).

Решение

При низких частотах $\hbar\omega \ll kT$ можно разложить входящую в формулу Планка экспоненту в ряд Тейлора:

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

Ограничиваясь первыми двумя членами, получим

$$\rho_\omega(T) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1} \approx \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \frac{1}{1 + \frac{\hbar\omega}{kT} - 1} = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} kT,$$

что совпадает с законом Рэлея–Джинса. При учете следующего члена разложения экспоненты получим

$$\rho_\omega(T) \approx \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} kT \frac{1}{1 + \frac{\hbar\omega}{2kT}} \approx \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} kT \left(1 - \frac{\hbar\omega}{2kT}\right) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} kT - \frac{\hbar\omega^3}{2\pi^2 c^3}.$$

Заслуживает внимания то, что первый поправочный член к классической формуле Рэлея–Джинса не зависит от температуры.

$$\text{Ответ: } \rho_\omega(T) \approx \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} kT.$$

Задача 1.3.2. Основываясь на формуле Планка для спектральной плотности энергии $\rho_\omega(T)$ равновесного электро-

магнитного излучения, получить асимптотическую зависимость спектральной плотности энергии при $\hbar\omega \gg kT$ (закон Вина).

Решение

При высоких частотах $\hbar\omega \gg kT$ формулу Планка удобно представить в виде:

$$\rho_{\omega}(T) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1} = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right) \left[1 - \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right)\right]^{-1}.$$

Выражение в квадратных скобках есть не что иное как сумма геометрической прогрессии:

$$\left[1 - \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right)\right]^{-1} = 1 + \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right) + \exp\left(-\frac{2\hbar\omega}{kT}\right) + \dots$$

В результате получим асимптотическую формулу:

$$\rho_{\omega}(T) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right) \left[1 + \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right) + \exp\left(-\frac{2\hbar\omega}{kT}\right) + \dots\right].$$

Если ограничиться только первым членом, то получим закон Вина:

$$\rho_{\omega}(T) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right).$$

Ответ: $\rho_{\omega}(T) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right).$

Задача 1.3.3. Оценить концентрацию фотонов оптического спектра $n_{\text{опт}}$ в темной комнате при нормальной температуре.

Решение

Будем рассматривать темную комнату (без окон и с плотно закрытой дверью) как абсолютно черное тело при температуре $T = 300$ К. Согласно результатам задачи 1.2.7, концентрация всех фотонов в темной комнате будет равна $n = 5,5 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-3}$. Возникает вопрос: почему человек, находящейся в темной комнате, ничего не видит? Для ответа на этот вопрос оценим концентрацию фотонов оптического спектра $n_{\text{опт}}$.

Электромагнитные волны оптического спектра имеют длину волны $\lambda_{\text{опт}}$ в интервале $(0,38 \div 0,78) \cdot 10^{-6}$ м, что соответствует частотам от $\omega_{\text{мин}} = 2,41 \cdot 10^{15}$ с⁻¹ до $\omega_{\text{макс}} = 4,96 \cdot 10^{15}$ с⁻¹. В то же время, согласно формуле Вина, максимум спектральной плотности $\rho_{\lambda}(T)$ приходится на длину волны

$$\lambda_{\text{макс}} = \frac{(2,897 \cdot 10^{-3} \text{ м} \cdot \text{К})}{T} = (9,66 \cdot 10^{-6} \text{ м}) \gg \lambda_{\text{опт}}.$$

Таким образом, оптический спектр лежит вдали от максимума спектральной плотности. Поэтому при вычислении интеграла (см. задачу 1.2.7)

$$n_{\text{опт}} = \int_{\omega_{\text{мин}}}^{\omega_{\text{макс}}} \frac{\rho_{\omega}(T)}{\hbar\omega} d\omega$$

можно использовать формулу Вина. Действительно,

$$\frac{\hbar\omega_{\text{мин}}}{kT} = 61,5 \gg 1.$$

Тогда

$$n_{\text{опт}} \approx \int_{\omega_{\text{мин}}}^{\omega_{\text{макс}}} \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right) d\omega.$$

Поскольку под интегралом стоит функция, монотонно убывающая в интервале $(\omega_{\text{мин}}, \omega_{\text{макс}})$, то концентрация $n_{\text{опт}}$ во всяком случае меньше, чем

$$\frac{\omega_{\text{мин}}^2}{\pi^2 c^3} \exp\left(-\frac{\hbar\omega_{\text{мин}}}{kT}\right) (\omega_{\text{макс}} - \omega_{\text{мин}}) = 1,1 \cdot 10^{-7} \text{ м}^{-3},$$

т.е. концентрация фотонов оптического спектра в темной комнате крайне мала. Именно поэтому человек, находящийся в темной комнате, ничего не видит.

Замечание. При желании можно получить более точную оценку для концентрации $n_{\text{опт}}$. Для этого достаточно взять написанный выше интеграл путем двукратного интегрирования по частям:

$$n_{\text{опт}} \approx -\frac{\omega^3}{\pi^2 c^3} \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right) \left[\left(\frac{kT}{\hbar\omega}\right) + 2\left(\frac{kT}{\hbar\omega}\right)^2 + 2\left(\frac{kT}{\hbar\omega}\right)^3 \right] \Bigg|_{\omega_{\text{мин}}}^{\omega_{\text{макс}}} \approx$$

$$\approx \frac{\omega_{\min}^3}{\pi^2 c^3} \left(\frac{kT}{\hbar \omega_{\min}} \right) \exp \left(-\frac{\hbar \omega_{\min}}{kT} \right) = 1,7 \cdot 10^{-9} \text{ м}^{-3}.$$

Ответ: $n_{\text{опт}} < 1,1 \cdot 10^{-7} \text{ м}^{-3}$.

Задача 1.3.4. Определить солнечную постоянную β (плотность потока энергии солнечного излучения у поверхности Земли). Средний радиус земной орбиты $r = 1,5 \cdot 10^{11} \text{ м}$, радиус Солнца $R = 7 \cdot 10^8 \text{ м}$. Считать, что температура на поверхности Солнца $T = 5770 \text{ К}$.

Решение

Если рассматривать Солнце в качестве абсолютно черного тела при температуре $T = 5770 \text{ К}$, то плотность потока энергии излучения с его поверхности (излучательная способность) определяется законом Стефана-Больцмана (см. задачу 1.2.6)

$$S = \sigma T^4, \quad \text{где} \quad \sigma = \frac{\pi^2 k^4}{60 \hbar^3 c^2}.$$

Поток энергии излучения через любую сферическую поверхность, внутри которой находится Солнце, одинаков. В частности,

$$S \cdot 4\pi R^2 = \beta \cdot 4\pi r^2,$$

откуда

$$\beta = \frac{R^2}{r^2} S = \frac{R^2}{r^2} \sigma T^4 = 1,36 \cdot 10^3 \text{ Вт} \cdot \text{м}^{-2}.$$

Ответ: $\beta = \frac{R^2}{r^2} \sigma T^4 = 1,36 \cdot 10^3 \text{ Вт} \cdot \text{м}^{-2}$.

1.4. Задачи для самостоятельного решения

Задача 1.4.1. Излучение Солнца по своему спектральному составу близко к излучению абсолютно черного тела, для которого максимум спектральной плотности энергии приходится на длину волны $\lambda_{\max} = 0,48 \text{ мкм}$. Радиус Солнца $R = 7 \cdot 10^8 \text{ м}$, масса $M = 2 \cdot 10^{30} \text{ кг}$. Найти:

а) массу δm , теряемую Солнцем каждую секунду за счет излучения;

б) какую часть $\Delta M/M$ своей массы Солнце теряет за время $\tau = 1$ год?

$$\text{Ответ: а) } \delta m = \frac{4\pi R^2 \sigma}{c^2} \left(\frac{b}{\lambda_{\max}} \right)^4 = 5 \cdot 10^9 \text{ кг} \cdot \text{с}^{-1};$$

$$\text{б) } \frac{\Delta M}{M} = \frac{\tau \delta m}{M} = 8 \cdot 10^{-14}.$$

Задача 1.4.2. Считая Солнце и Землю абсолютно черными телами, находящимися в состоянии теплового равновесия, оценить температуру Земли T_1 . Средний радиус земной орбиты $r = 1,5 \cdot 10^{11}$ м, температура на поверхности Солнца $T = 6000$ К, радиус Солнца $R = 7 \cdot 10^8$ м.

$$\text{Ответ: } T_1 = T \sqrt{\frac{R}{2r}} = 290 \text{ К}.$$

Задача 1.4.3 (1.6 [1]). Найти зависимость средней по спектру энергии \bar{E} фотонов от температуры.

$$\text{Ответ: } \bar{E} = \frac{\pi^4}{36,06} kT.$$

Задача 1.4.4. Исходя из формулы Планка для спектральной плотности энергии $\rho_\omega(T)$, получить связь между частотой ω_{\max} , при которой спектральная плотность $\rho_\omega(T)$ максимальна, и температурой абсолютно черного тела. Вычислить частоту ω_1 , соответствующую длине волны λ_{\max} (см. задачу 1.2.4). Найти отношение частот ω_1/ω_{\max} .

$$\text{Ответ: } \omega_{\max} = \left(3,7 \cdot 10^{11} \text{ с}^{-1} \cdot \text{К}^{-1} \right) \cdot T,$$

$$\omega_1 = \left(6,5 \cdot 10^{11} \text{ с}^{-1} \cdot \text{К}^{-1} \right) \cdot T, \quad \omega_1/\omega_{\max} = 1,76.$$

Задача 1.4.5 (1.16 [1]). Оценить концентрацию n квантов равновесного электромагнитного излучения с энергией $\hbar\omega > \hbar\omega_0 = 1$ эВ при температуре $T = 300$ К.

$$\text{Ответ: } n \approx \frac{\omega_0^3}{\pi^2 c^3} \left(\frac{kT}{\hbar \omega_0} \right) \exp \left(-\frac{\hbar \omega_0}{kT} \right) = 5,7 \text{ м}^{-3}.$$

Задача 1.4.6 (1.18 [1]). Оценить концентрацию n квантов равновесного электромагнитного излучения с энергией $\hbar \omega < \hbar \omega_0 = 0,1 \text{ эВ}$ при температуре $T = 1 \text{ эВ/к}$.

$$\text{Ответ: } n \approx \frac{kT \omega_0^2}{2\pi^2 \hbar c^3} = 6,6 \cdot 10^{16} \text{ м}^{-3}.$$

Задача 1.4.7 (1.19 [1]). Равновесное тепловое излучение находится при температуре 2000 К. На сколько градусов ΔT изменится температура, если соответствующая максимуму в спектре длина волны λ_{\max} увеличится на $\Delta \lambda = 260 \text{ нм}$?

$$\text{Ответ: } \Delta T = -304 \text{ К}.$$

Задача 1.4.8 (1.21 [1]). Реликтовое излучение соответствует излучению абсолютно черного тела при температуре $T = 2,7 \text{ К}$. Определите:

- а) λ_{\max} реликтового излучения;
- б) концентрацию фотонов n реликтового излучения;
- в) среднюю длину волны $\bar{\lambda}$ реликтового излучения.

$$\text{Ответ: } \quad \text{а) } \lambda_{\max} = 1 \text{ мм}; \quad \text{б) } n = 4 \cdot 10^8 \text{ м}^{-3};$$

$$\text{в) } \bar{\lambda} = \frac{\pi^3 \hbar c}{7,2 kT} = 3,6 \text{ мм}.$$

Список литературы

1. Сборник задач по атомной физике. Под ред. С.С. Красильникова, А.М. Попова, О.В. Тихоновой. – М.: Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, 2010. – 217 с.
2. Фейнман Р., Лейтон Р., Сэндс М. Фейнмановские лекции по физике. Вып. 4: Кинетика. Теплота. Звук. – М.: УРСС: Книжный дом «ЛИБРОКОМ», 2011. – 264 с.

ГЛАВА 2 КОРПУСКУЛЯРНЫЕ СВОЙСТВА ИЗЛУЧЕНИЯ

2.1. Теоретический материал

1. Фотоны. Плоскую монохроматическую электромагнитную волну с частотой ω и волновым вектором \mathbf{k} можно представить в виде пучка частиц, *фотонов*, с энергией

$$E = \hbar\omega$$

и импульсом

$$\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}.$$

Масса фотона $m = 0$, спин $s = 1$.

2. Внешний фотоэффект.

Принципиальная схема экспериментальной установки для наблюдения фотоэффекта и типичная вольт-амперная характеристика фотоэлемента представлены на рис. 2.1. Свет, падая на катод, выбивает из него электроны, при этом в цепи появляется электрический ток. В результате исследований были установлены три закона фотоэффекта:

1. При фиксированной частоте излучения фототок насыщения $J_{\text{нас}}$ прямо пропорционален интенсивности падающего света (закон Столетова).

2. Существует граничная частота света ω_{min} , ниже кото-

рой для данного материала катода фотоэффект отсутствует, независимо от интенсивности падающего света и продолжительности облучения катода.

3. Электроны покидают поверхность катода с кинетическими энергиями от нуля до максимальной энергии T_{max} , которая не

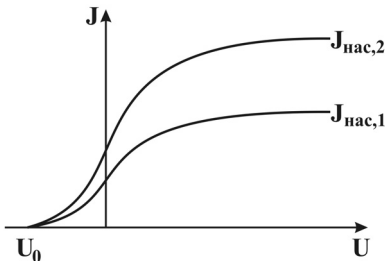
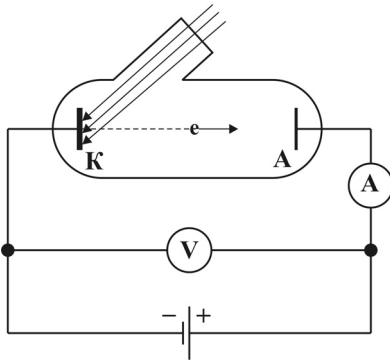


Рис. 2.1. Принципиальная схема экспериментальной установки для наблюдения фотоэффекта и типичная вольт-амперная характеристика фотоэлемента; U_0 – запирающее напряжение; ток насыщения $J_{\text{нас},2}$ соответствует большей интенсивности падающего света, чем $J_{\text{нас},1}$.

зависит от интенсивности падающего света и линейно зависит от частоты.

Законы фотоэффекта могут быть объяснены с помощью уравнения Эйнштейна:

$$\hbar\omega = T_{\max} + A_{\text{вых}},$$

где $\hbar\omega$ – энергия падающего на катод фотона, T_{\max} – максимальная кинетическая энергия вылетающего электрона, $A_{\text{вых}}$ – работа выхода электрона из металла.

3. Давление света. Если свет падает нормально на зеркальную поверхность, то он оказывает на неё давление

$$P = \frac{I}{c}(1 + R),$$

где I – интенсивность падающего света, R – коэффициент отражения по энергии.

4. Эффект Комптона. При рассеянии фотона на покоящемся электроне, его длина волны λ_0 увеличивается на величину

$$\Delta\lambda = \lambda_K (1 - \cos\theta),$$

где θ – угол рассеяния фотона, $\lambda_K = \frac{h}{mc} = 2,43 \cdot 10^{-12}$ м – комптоновская длина волны электрона.

Замечание. В описанных выше явлениях электромагнитное излучение проявляет корпускулярные свойства. В отличие от классического представления, согласно которому энергия электромагнитного поля пропорциональна квадрату амплитуд электрического \mathbf{E} и магнитного поля \mathbf{B} , энергия фотона зависит от частоты. С классической точки зрения, электромагнитная волна, падающая на полупрозрачное зеркало, разбивается на две, интенсивность которых в два раза меньше. Однако многочисленные эксперименты свидетельствуют о неделимости фотона. Падая на полупрозрачное зеркало, фотон не изменяет свою энергию, а может либо пройти, либо отразиться с вероятностью одна вторая. Таким образом, классическая энергия поля (пропорциональная интегралу от суммы квадратов амплитуд \mathbf{E} и \mathbf{B} по некоторой конечной области пространства) не равна энергии, вносимой фотоном в эту область. Поэтому неправильно интерпретировать сумму квадратов амплитуд \mathbf{E} и \mathbf{B} как объемную плотность энергии. Интеграл от суммы квадратов амплитуд \mathbf{E} и \mathbf{B} по некоторой области пространства пропорционален *вероятности*

обнаружения фотона в данной области. При этом среднее значение отраженной или прошедшей энергии, вычисленное для большого числа фотонов, будет совпадать с классическим результатом.

5. Тормозное рентгеновское излучение. Если ускоренные разностью потенциалов U электроны попадают в вещество, то происходит их торможение электростатическим полем атомных ядер и атомарных электронов вещества, сопровождаемое излучением фотонов в рентгеновском спектре ($\lambda = 10^{-2} \div 10^2$ А). При фиксированной разности потенциалов U существует коротковолновая граница рентгеновского излучения λ_{\min} . Считая, что масса ядра, на котором происходит рассеяние, много больше массы электрона, можно получить простую оценку:

$$\lambda_{\min} \approx \frac{hc}{|q_e|U},$$

где q_e – заряд электрона.

6. Релятивистская механика. Напомним некоторые полезные формулы релятивистской механики материальной точки. Импульс и энергия свободной релятивистской частицы, движущейся со скоростью v , равны

$$\mathbf{p} = \frac{m\mathbf{v}}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad \text{и} \quad E = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}},$$

где m – масса частицы, c – скорость света. Энергия и импульс частицы связаны между собой соотношением:

$$E^2 = (mc^2)^2 + (pc)^2.$$

Кинетическая энергия частицы равна

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

Если скорость частицы мала по сравнению со скоростью света ($v \ll c$), то частица называется *нерелятивистской*. Если скорость частицы близка к скорости света ($c - v \ll c$), частица называется *ультрарелятивистской*. Отдельно отметим случай безмассовых частиц, для которых $v = c$ и $E = pc$.

2.2. Задачи с решениями

Задача 2.2.1. Объясните законы фотоэффекта, используя представления о квантах электромагнитного излучения и уравнение Эйнштейна.

Решение

Прежде чем приступить к решению задачи, определим, как интенсивность I плоской электромагнитной волны связана с концентрацией n и энергией $\hbar\omega$ фотонов. Для этого рассмотрим пучок фотонов, падающий нормально на некоторую воображаемую площадку площадью Σ (см. рис. 2.2). За время Δt через эту площадку пролетит $\Delta N = n \cdot \Sigma \cdot c \Delta t$ фотонов, энергия которых $\Delta E = \hbar\omega \cdot \Delta N$. Интенсивность такой электромагнитной волны равна

$$I = \frac{\Delta E}{\Sigma \Delta t} = n \hbar \omega c = \rho c ,$$

где $\rho = n \hbar \omega$ – объемная плотность энергии волны. Обратим внимание на то, что соотношение $I = \rho c$ легко получить в рамках классической электродинамики.

Второй и третий законы фотоэффекта следуют непосредственно из формулы Эйнштейна:

$$\hbar\omega = T_{\max} + A_{\text{вых}} .$$

Действительно, если переписать её в виде

$$T_{\max} = \hbar\omega - A_{\text{вых}} \geq 0 ,$$

то видно, что, во-первых, существует красная граница фотоэффекта $\omega_{\min} = A_{\text{вых}} / \hbar$ – частота, при которой $T_{\max} = 0$. Очевидно, что ω_{\min} зависит только от работы выхода катода и не зависит ни от интенсивности падающего света, ни от продолжительности облучения. Это второй закон фотоэффекта. Кроме того, T_{\max} линейно зависит от частоты и не зависит от интенсивности падающего света. Это третий закон фотоэффекта.

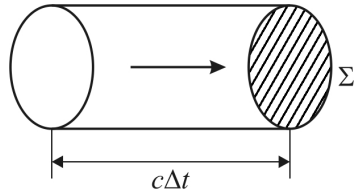


Рис. 2.2. Нормальное падение света на площадку площадью Σ .

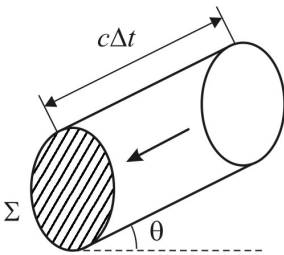


Рис. 2.3. Падение света на катод площадью Σ под углом θ .

Для объяснения первого закона фотоэффекта рассмотрим монохроматический свет, падающий на катод площадью Σ под углом θ (см. рис. 2.3). Число фотонов ΔN , падающих на катод за время Δt , равно

$$\Delta N = n \cdot \Sigma \cdot c \Delta t \cos \theta = \frac{I}{\hbar \omega} \Sigma \Delta t \cos \theta.$$

Будем считать, что каждый фотон, падающий на катод, выбивает из него один электрон. При большой разности потенциалов между катодом и анодом все выбитые из катода электроны долетят до анода. Тогда ток насыщения $J_{\text{нас}}$ можно оценить по формуле

$$J_{\text{нас}} = \frac{\Delta Q}{\Delta t} = \frac{|q_e| \Delta N}{\Delta t} = \frac{|q_e| I}{\hbar \omega} \Sigma \cos \theta,$$

т.е. при фиксированной частоте света ток насыщения прямо пропорционален интенсивности падающего света.

Замечания

1. Законы фотоэффекта нельзя объяснить с помощью классической электродинамики. Действительно, при увеличении интенсивности света должна увеличиваться энергия, передаваемая электронам металла, следовательно, должна увеличиваться T_{max} , что противоречит третьему закону фотоэффекта.

2. По классической теории энергия, передаваемая электрону электромагнитным полем, пропорциональна интенсивности света, поэтому свет любой частоты, но достаточно большой интенсивности должен был бы вырывать электроны из металла, то есть красной границы фотоэффекта не существовало бы, что противоречит второму закону фотоэффекта.

3. Кроме того, внешний фотоэффект является малоинерционным. Время запаздывания фототока не превышает 10^{-9} с. Классическая теория не может объяснить столь малые времена запаздывания.

4. Следует отметить, что при большой интенсивности светового пучка могут происходить процессы многофотонного поглощения, а красная граница исчезает.

Задача 2.2.2. Когда длину волны монохроматического света, освещающего поверхность некоторого металла, изменили с $\lambda_1 = 0,35$ мкм на $\lambda_2 = 0,54$ мкм, максимальная скорость фотоэлектронов уменьшилась в два раза. Найти работу выхода электронов с поверхности этого металла.

Решение

Оценим энергию фотона с длиной волны $\lambda_1 = 0,35$ мкм :

$$E_{\text{ф}} = \hbar\omega_1 = \frac{hc}{\lambda_1} = 3,5 \text{ эВ}.$$

Видно, что $T_{\text{max}} < E_{\text{ф}} \ll mc^2 = 511$ кэВ, поэтому для кинетической энергии электрона можно использовать нерелятивистское приближение $T_{\text{max}} = mv_{\text{max}}^2/2$. По условию задачи $v_{\text{max},2} = v_{\text{max},1}/2$. Поэтому уравнения Эйнштейна для фотонов с длиной волны λ_1 и λ_2 можно записать в виде:

$$\frac{hc}{\lambda_1} = \frac{mv_{\text{max},1}^2}{2} + A_{\text{вых}}, \quad (2.1)$$

$$4\frac{hc}{\lambda_2} = \frac{mv_{\text{max},1}^2}{2} + 4A_{\text{вых}}. \quad (2.2)$$

Вычитая (2.1) из (2.2), получим:

$$A_{\text{вых}} = \frac{hc}{3} \left(\frac{4}{\lambda_2} - \frac{1}{\lambda_1} \right) = 1,9 \text{ эВ}.$$

Ответ: $A_{\text{вых}} = \frac{hc}{3} \left(\frac{4}{\lambda_2} - \frac{1}{\lambda_1} \right) = 1,9 \text{ эВ}.$

Задача 2.2.3. Свет в виде плоской монохроматической волны, имеющей интенсивность I , падает из вакуума под углом θ на отражающую поверхность. Коэффициент отражения по энергии равен R . Определить давление P , оказываемое светом на поверхность, а также силу F_{τ} , действующую по касательной к поверхности. Площадь поверхности Σ .

Решение

Вычислим импульс \mathbf{p}_i фотонов, падающих на площадку площадью Σ за время Δt . Как видно из рис. 2.4,

$$\mathbf{p}_i = \Delta N \cdot \hbar \mathbf{k} = n \cdot (c \Delta t \cdot \Sigma \cdot \cos \theta) \cdot \hbar \frac{\omega}{c} \mathbf{e}_i = \frac{I}{c} (\Delta t \cdot \Sigma \cdot \cos \theta) \mathbf{e}_i, \quad (2.3)$$

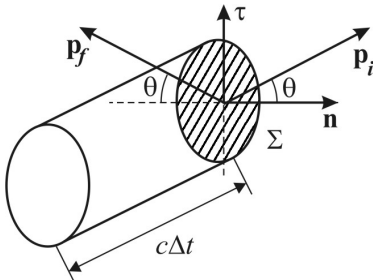


Рис. 2.4. Импульсы фотонов, падающих на площадку и отраженных от неё.

где \mathbf{e}_i – единичный вектор в направлении падающей волны. Если отражающая поверхность гладкая, то выражение, аналогичное (2.3), можно написать и для импульса \mathbf{p}_f фотонов, отраженных от поверхности:

$$\mathbf{p}_f = \frac{IR}{c} (\Delta t \cdot \Sigma \cdot \cos \theta) \mathbf{e}_f, \quad (2.4)$$

где \mathbf{e}_f – единичный вектор в направлении отраженной волны. В выражении (2.4) мы учли, что интенсивность отраженного света равна IR . Используя (2.3) и (2.4), легко найти силу, действующую со стороны света на площадку:

$$\mathbf{F} = \frac{1}{\Delta t} (\mathbf{p}_i - \mathbf{p}_f) = \frac{I}{c} \Sigma \cos \theta (\mathbf{e}_i - R \mathbf{e}_f).$$

Нормальная составляющая этой силы равна

$$F_n = \frac{I}{c} \Sigma \cos \theta (\cos \theta + R \cos \theta) = \frac{I}{c} (1 + R) \Sigma \cos^2 \theta,$$

а тангенциальная –

$$F_\tau = \frac{I}{c} \Sigma \cos \theta (\sin \theta - R \sin \theta) = \frac{I}{c} (1 - R) \Sigma \sin \theta \cos \theta.$$

Давление, оказываемое светом на поверхность, равно

$$P = \frac{F_n}{\Sigma} = \frac{I}{c} (1 + R) \cos^2 \theta. \quad (2.5)$$

Замечание. Выражение (2.5) для давления света можно получить в рамках классической электродинамики. Поэтому существование светового давления не является доказательством квантовой природы света. Тем не менее, на примере светового

давления интересно убедиться в том, что представления о фотонах не противоречат классической электродинамике.

Ответ: $P = \frac{I}{c}(1+R)\cos^2\theta$, $F_r = \frac{I}{c}(1-R)\sin\theta\cos\theta$.

Задача 2.2.4. Плоская монохроматическая световая волна, имеющая интенсивность I , падает из вакуума на отражающий шар. Коэффициент отражения по энергии равен R . Радиус шара r . Определить силу F светового давления на шар.

Решение

Рассмотрим участок поверхности шара площадью dS . Пусть свет падает на него под углом θ (см. рис. 2.5). На этот участок будет действовать сила, проекции F_n и F_τ которой были найдены в задаче 2.2.3:

$$F_n = \frac{I}{c}(1+R)\cos^2\theta dS,$$

$$F_\tau = \frac{I}{c}(1-R)\sin\theta\cos\theta dS.$$

Тогда полная сила, действующая на шар, равна

$$F = \int (F_n \cos\theta + F_\tau \sin\theta) dS =$$

$$= \frac{I}{c} 2\pi r^2 \int_0^{\pi/2} [(1+R)\cos^3\theta \sin\theta + (1-R)\cos\theta \sin^3\theta] d\theta =$$

$$= \frac{I}{c} 2\pi r^2 \left[\frac{1}{4}(1+R) + \frac{1}{4}(1-R) \right] = \frac{I}{c} \pi r^2.$$

Замечание. Отметим, что сила давления на шар не зависит от коэффициента отражения R . (Если освещать весь шар!)

Ответ: $F = \frac{I}{c} \pi r^2$.

Задача 2.2.5. Красная лазерная указка имеет выходную мощность излучения $W = 1$ мВт, длину волны излучения $\lambda = 650$ нм, диаметр пучка $d = 2$ мм. Оцените

а) число фотонов N , излучаемых указкой за секунду;

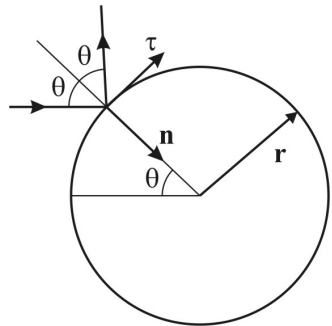


Рис. 2.5. Отражение света от поверхности шара.

б) энергию одного фотона E_ϕ в джоулях и электронвольтах;

в) давление, которое оказывают фотоны на поверхность, расположенную нормально к лучу, если ее коэффициент отражения равен $R = 0,5$.

Решение

Излучаемая указкой мощностью W за время Δt энергия равна энергии N фотонов, излучаемых за это же время:

$$W\Delta t = N\hbar\omega.$$

Откуда

$$N = \frac{W\Delta t}{\hbar\omega} = \frac{W\Delta t\lambda}{hc} = \frac{10^{-3} \cdot 1 \cdot 650 \cdot 10^{-9}}{6,626 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^8} = 3,27 \cdot 10^{15}.$$

Энергия одного фотона равна

$$E_\phi = \hbar\omega = \frac{hc}{\lambda} = \frac{6,626 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^8}{650 \cdot 10^{-9}} = 3,06 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}.$$

Один электронвольт – это энергия, которую приобретает электрон, ускоренный разностью потенциалов в один вольт

$$1 \text{ эВ} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Дж},$$

поэтому $E_\phi = 1,91 \text{ эВ}$.

Интенсивность излучения лазерной указки равна

$$I = \frac{W}{\pi(d/2)^2} = \frac{10^{-3}}{3,14 \cdot 10^{-6}} = 318 \text{ Вт} \cdot \text{м}^{-2}.$$

Интересно сравнить её с солнечной постоянной (см. главу 1)

$$\beta = 1,36 \cdot 10^3 \text{ Вт} \cdot \text{м}^{-2}.$$

Давление света оценим по формуле (2.5), полученной в задаче 2.2.3:

$$P = \frac{I}{c}(1+R) = \frac{318}{3 \cdot 10^8} \cdot 1,5 = 1,6 \cdot 10^{-6} \text{ Па}.$$

$$\text{Ответ: а) } N = \frac{W \Delta t \lambda}{hc} = 3,27 \cdot 10^{15},$$

$$\text{б) } E_{\phi} = \frac{hc}{\lambda} = 3,06 \cdot 10^{-19} \text{ Дж} = 1,91 \text{ эВ},$$

$$\text{в) } P = \frac{W}{\pi(d/2)^2} \frac{(1+R)}{c} = 1,6 \cdot 10^{-6} \text{ Па}.$$

Задача 2.2.6. Доказать, что свободно движущийся электрон не может излучить фотон.

Решение

Прежде, чем решать эту задачу, отметим, что с точки зрения классической физики это утверждение очевидно. Действительно, свободный электрон движется равномерно и прямолинейно, т.е. без ускорения, а излучать электромагнитные волны могут только частицы, двигающиеся с ускорением.

Теперь рассмотрим эту задачу, используя представление о фотонах. Пусть в начальном состоянии имеется электрон с импульсом \mathbf{p}_i и энергией $E_i = \sqrt{(mc^2)^2 + (p_i c)^2}$, а в конечном состоянии – электрон с импульсом \mathbf{p}_f и энергией $E_f = \sqrt{(mc^2)^2 + (p_f c)^2}$ и фотон с импульсом \mathbf{p}_{ϕ} и энергией $E_{\phi} = p_{\phi} c$. Запишем законы сохранения энергии и импульса в системе отсчета, в которой покоится электрон в конечном состоянии ($\mathbf{p}_f = 0$):

$$E_i = mc^2 + E_{\phi}, \quad (2.6)$$

$$\mathbf{p}_i = \mathbf{p}_{\phi}. \quad (2.7)$$

Возводя левую и правую части выражения (2.6) в квадрат, получим

$$(p_i c)^2 = 2E_{\phi} mc^2 + E_{\phi}^2. \quad (2.8)$$

С другой стороны, из (2.7) следует, что

$$(p_i c)^2 = (p_{\phi} c)^2 = E_{\phi}^2. \quad (2.9)$$

Сравнивая (2.8) и (2.9), получаем, что $2E_{\phi}mc^2 = 0$. Таким образом, излучение фотона свободным электроном запрещено законами сохранения энергии и импульса.

Замечания

1. Аналогично можно доказать, что свободный электрон не может поглотить фотон. Для этого достаточно в приведенном выше решении поменять местами электроны в начальном и конечном состояниях ($i \leftrightarrow f$). Отметим, что при рассмотрении фотоэффекта мы предполагали, что фотоны поглощаются электронами. Однако электроны в металле не являются свободными, и никаких противоречий с законами сохранения энергии и импульса не возникает.

2. Рассмотрим рождение фотона в результате аннигиляции электрон-позитронной пары. В этом случае законы сохранения энергии и импульса будут иметь вид

$$E_{\nu} + E_{\pi} = E_{\phi} \quad \text{и} \quad \mathbf{p}_{\nu} + \mathbf{p}_{\pi} = \mathbf{p}_{\phi}.$$

Делая формальные переобозначения $E_{\nu} = E_i$, $\mathbf{p}_{\nu} = \mathbf{p}_i$, $E_{\pi} = -E_f$, $\mathbf{p}_{\pi} = -\mathbf{p}_f$, мы снова приходим к уравнениям (2.6) и (2.7). Таким образом, аннигиляция электрон-позитронной пары в один фотон также оказывается невозможной.

Задача 2.2.7. Фотон с длиной волны λ_0 рассеивается на покоящемся электроне. Найти длину волны λ фотона рассеянного под углом θ (см. рис. 2.6).

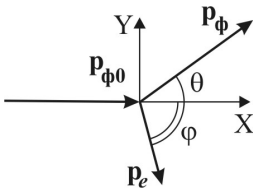


Рис. 2.6. Рассеяние фотона на покоящемся электроне.

Решение

Будем рассматривать рассеяние фотона на электроне с точки зрения законов релятивистской механики. По условию задачи в начальный момент времени электрон покоился, т.е. его начальный импульс равен нулю, а энергия равна энергии покоя mc^2 . Тогда законы сохранения энергии и импульса частиц будут иметь вид:

$$E_{\phi 0} + mc^2 = E_{\phi} + E_e, \quad (2.10)$$

$$\mathbf{p}_{\phi 0} = \mathbf{p}_{\phi} + \mathbf{p}_e, \quad (2.11)$$

где энергия E_e и импульс \mathbf{p}_e электрона в конечном состоянии связаны друг с другом соотношением:

$$E_e^2 = (mc^2)^2 + (\mathbf{p}_e c)^2, \quad (2.12)$$

а энергии $E_{\phi 0}$, E_ϕ и импульсы $\mathbf{p}_{\phi 0}$, \mathbf{p}_ϕ фотона в начальном и конечном состоянии – соотношениями:

$$E_{\phi 0} = \mathbf{p}_{\phi 0} c \quad \text{и} \quad E_\phi = \mathbf{p}_\phi c, \quad (2.13)$$

поскольку масса фотона равна нулю.

Из (2.10) выразим квадрат энергии электрона в конечном состоянии:

$$E_e^2 = E_{\phi 0}^2 + E_\phi^2 + (mc^2)^2 + 2mc^2(E_{\phi 0} - E_\phi) - 2E_{\phi 0}E_\phi. \quad (2.14)$$

С другой стороны, используя (2.11), (2.12) и (2.13), ту же величину можно представить в виде:

$$\begin{aligned} E_e^2 &= (mc^2)^2 + (\mathbf{p}_{\phi 0} - \mathbf{p}_\phi)^2 c^2 = \\ &= (mc^2)^2 + (\mathbf{p}_{\phi 0} c)^2 + (\mathbf{p}_\phi c)^2 - 2(\mathbf{p}_{\phi 0}, \mathbf{p}_\phi) c^2 = \\ &= (mc^2)^2 + E_{\phi 0}^2 + E_\phi^2 - 2E_{\phi 0}E_\phi \cos \theta. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Сравнивая (2.14) и (2.15), получим:

$$mc^2(E_{\phi 0} - E_\phi) = E_{\phi 0}E_\phi(1 - \cos \theta). \quad (2.16)$$

Поделив выражение (2.16) на $mc^2 E_{\phi 0} E_\phi$, запишем его в виде:

$$\frac{1}{E_\phi} - \frac{1}{E_{\phi 0}} = \frac{1}{mc^2}(1 - \cos \theta). \quad (2.17)$$

Формула (2.17) справедлива при рассеянии любых частиц с нулевой массой на покоящейся частице массы m .

Воспользуемся теперь тем, что энергия фотона связана с его частотой соотношением:

$$E_\phi = \hbar\omega = \hbar \frac{2\pi c}{\lambda} = \frac{hc}{\lambda}. \quad (2.18)$$

Подставляя (2.18) в (2.17), окончательно получим:

$$\lambda = \lambda_0 + \lambda_K(1 - \cos \theta), \quad (2.19)$$

где $\lambda_K = \frac{2\pi\hbar}{mc} = \frac{h}{mc} = 2,43 \cdot 10^{-12}$ м – комптоновская длина волны электрона.

Замечания.

1. Важно подчеркнуть, что при объяснении эффекта Комптона мы используем представление о свете, как о потоке частиц с нулевой массой. По классической же теории, электрон должен совершать вынужденные колебания с частотой падающей волны и никакого смещения частот и длин волн быть не должно. Таким образом, эффект Комптона является прямым экспериментальным доказательством существования квантов электромагнитного поля – фотонов.

2. Комптоновский сдвиг не зависит от длины волны падающего излучения, но вследствие малости λ_K будет заметен только для рентгеновского и γ -диапазонов электромагнитного спектра.

3. В случае сильно связанных электронов под m следует понимать массу атома, поэтому комптоновский сдвиг будет практически равен нулю.

Ответ: $\lambda = \lambda_0 + \frac{h}{mc}(1 - \cos\theta)$.

Задача 2.2.8. Найдите энергию рассеянного фотона $\hbar\omega$ и кинетическую энергию T электрона отдачи в экспериментах Комптона, считая известными энергию падающего фотона $\hbar\omega_0$ и угол рассеяния θ .

Решение

Длина волны фотона и его частота связаны формулой $\lambda = 2\pi c/\omega$. Поэтому выражение (2.19) для комптоновского сдвига длин волн:

$$\lambda - \lambda_0 = \frac{2\pi\hbar}{mc}(1 - \cos\theta)$$

можно записать в виде (2.17):

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

Выражая отсюда энергию рассеянного фотона $\hbar\omega$, получим

$$\hbar\omega = \frac{\hbar\omega_0}{1 + \frac{\hbar\omega_0}{mc^2}(1 - \cos\theta)}. \quad (2.20)$$

Чтобы найти кинетическую энергию T электрона отдачи, запишем закон сохранения энергии в виде:

$$\hbar\omega_0 + mc^2 = \hbar\omega + mc^2 + T,$$

откуда

$$\begin{aligned} T = \hbar\omega_0 - \hbar\omega &= \hbar\omega_0 \left[1 - \frac{1}{1 + \frac{\hbar\omega_0}{mc^2}(1 - \cos\theta)} \right] = \\ &= \hbar\omega_0 \frac{\frac{\hbar\omega_0}{mc^2}(1 - \cos\theta)}{1 + \frac{\hbar\omega_0}{mc^2}(1 - \cos\theta)} = \frac{\hbar\omega_0}{1 + \frac{\hbar\omega_0}{mc^2}(1 - \cos\theta)}. \end{aligned} \quad (2.21)$$

$$\text{Ответ: } \hbar\omega = \frac{\hbar\omega_0}{1 + \frac{\hbar\omega_0}{mc^2}(1 - \cos\theta)}, \quad T = \frac{\hbar\omega_0}{1 + \frac{\hbar\omega_0}{mc^2}(1 - \cos\theta)}.$$

Задача 2.2.9. Найдите угол отдачи φ электрона в экспериментах Комптона, считая известными энергию падающего фотона $\hbar\omega_0$ и угол рассеяния θ .

Решение

Рассмотрим рассеяние фотона на покоящемся электроне так же, как мы это делали в задаче 2.2.7. Запишем закон сохранения импульса (2.11) в проекциях на оси X и Y (см. рис. 2.6)

$$p_{\phi 0} = p_{\phi} \cos\theta + p_e \cos\varphi,$$

$$0 = p_{\phi} \sin\theta - p_e \sin\varphi.$$

Откуда

$$\operatorname{tg} \varphi = \frac{p_{\phi} \sin\theta}{p_{\phi 0} - p_{\phi} \cos\theta} = \frac{\sin\theta}{\frac{p_{\phi 0}}{p_{\phi}} - \cos\theta} = \frac{\sin\theta}{\frac{\hbar\omega_0}{\hbar\omega} - \cos\theta}. \quad (2.22)$$

Здесь мы воспользовались законом дисперсии для фотона: $\hbar\omega = pc$. Подставляя в (2.22) формулу (2.20) для энергии, получим:

$$\operatorname{tg} \varphi = \frac{\sin \theta}{(1 - \cos \theta) \left[1 + \frac{\hbar\omega_0}{mc^2} \right]} = \frac{\operatorname{ctg} \frac{\theta}{2}}{1 + \frac{\hbar\omega_0}{mc^2}}.$$

При увеличении угла рассеяния θ от 0 до π угол отдачи электрона монотонно убывает от $\pi/2$ до 0.

Ответ:
$$\operatorname{tg} \varphi = \frac{\operatorname{ctg} \frac{\theta}{2}}{1 + \frac{\hbar\omega_0}{mc^2}}.$$

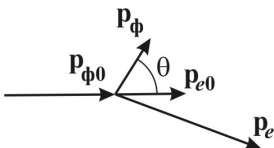


Рис. 2.7. Рассеяние фотона на движущемся электроне.

Задача 2.2.10. Фотон с длиной волны λ_0 рассеивается на электроне, движущемся с импульсом p_{e0} в том же направлении, что и фотон (см. рис. 2.7). Найти длину волны λ рассеянного фотона, если известно, что угол рассеяния фотона равен θ .

Решение

Будем решать эту задачу так же, как задачу 2.2.7. Запишем законы сохранения энергии и импульса:

$$E_{\Phi 0} + E_{e0} = E_{\Phi} + E_e, \quad (2.23)$$

$$\mathbf{p}_{\Phi 0} + \mathbf{p}_{e0} = \mathbf{p}_{\Phi} + \mathbf{p}_e, \quad (2.24)$$

где энергии E_{e0} и E_e и импульсы \mathbf{p}_{e0} и \mathbf{p}_e электрона в начальном и конечном состояниях соответственно связаны друг с другом соотношениями:

$$E_{e0}^2 = (mc^2)^2 + (\mathbf{p}_{e0}c)^2 \quad \text{и} \quad E_e^2 = (mc^2)^2 + (\mathbf{p}_e c)^2, \quad (2.25)$$

а энергии $E_{\Phi 0}$ и E_{Φ} и импульсы $\mathbf{p}_{\Phi 0}$ и \mathbf{p}_{Φ} фотона в начальном и конечном состояниях соответственно связаны соотношениями:

$$E_{\Phi 0} = \mathbf{p}_{\Phi 0}c \quad \text{и} \quad E_{\Phi} = \mathbf{p}_{\Phi}c, \quad (2.26)$$

поскольку масса фотона равна нулю.

Из закона сохранения импульса (2.24) мы можем выразить квадрат импульса электрона в конечном состоянии:

$$p_e^2 = (\mathbf{p}_{\phi 0} - \mathbf{p}_{\phi} + \mathbf{p}_{e0})^2 = \\ = p_{\phi 0}^2 + p_{\phi}^2 + p_{e0}^2 + 2p_{\phi 0}p_{e0} - 2p_{\phi 0}p_{\phi} \cos \theta - 2p_{\phi}p_{e0} \cos \theta. \quad (2.27)$$

С другой стороны, пользуясь выражениями (2.23), (2.25) и (2.26), ту же величину можно представить в виде:

$$p_e^2 = \frac{1}{c^2} \left[(E_{\phi 0} - E_{\phi} + E_{e0})^2 - (mc^2)^2 \right] = \\ = \frac{1}{c^2} \left[E_{\phi 0}^2 + E_{\phi}^2 + E_{e0}^2 + 2E_{\phi 0}E_{e0} - 2E_{\phi 0}E_{\phi} - 2E_{\phi}E_{e0} - (mc^2)^2 \right] = \\ = p_{\phi 0}^2 + p_{\phi}^2 + p_{e0}^2 + 2\frac{E_{e0}}{c}(p_{\phi 0} - p_{\phi}) - 2p_{\phi 0}p_{\phi}. \quad (2.28)$$

Сравнивая выражения (2.27) и (2.28), получим:

$$\frac{E_{e0}}{c}(p_{\phi 0} - p_{\phi}) = p_{e0}(p_{\phi 0} - p_{\phi} \cos \theta) + p_{\phi 0}p_{\phi}(1 - \cos \theta). \quad (2.29)$$

Воспользуемся тем, что импульс фотона связан с его длиной волны соотношением $p_{\phi} = h/\lambda$, и после простых алгебраических преобразований из (2.29) получим:

$$\lambda = \lambda_0 + \lambda_0 \frac{\left(p_{e0} + \frac{h}{\lambda_0} \right) c}{\sqrt{(mc^2)^2 + (p_{e0}c)^2} - p_{e0}c} (1 - \cos \theta). \quad (2.30)$$

При $p_{e0} = 0$ формула (2.30), очевидно, переходит в

$$\lambda = \lambda_0 + \frac{h}{mc}(1 - \cos \theta).$$

Замечание. Задачу о рассеянии монохроматической электромагнитной волны на движущемся электроне можно решить в рамках классической электродинамики. При этом длина рассеянной волны изменяется вследствие эффекта Доплера. Можно показать, что

$$\lambda_{\text{кл}} = \lambda_0 + \lambda_0 \frac{p_{e0}c}{\sqrt{(mc^2)^2 + (p_{e0}c)^2} - p_{e0}c} (1 - \cos \theta). \quad (2.31)$$

Видно, что (2.30) переходит в (2.31), если импульсом фотона $p_\phi = h/\lambda$ можно пренебречь по сравнению с начальным импульсом p_{e0} электрона. Более подробное обсуждение этого вопроса можно найти в книге [2] (глава 1, §5).

$$\text{Ответ: } \lambda = \lambda_0 + \lambda_0 \frac{\left(p_{e0} + \frac{h}{\lambda_0} \right) c}{\sqrt{(mc^2)^2 + (p_{e0}c)^2} - p_{e0}c} (1 - \cos\theta).$$

Задача 2.2.11. Рассмотрите эффект Комптона при угле рассеяния $\theta = 90^\circ$ для рентгеновского излучения с $\lambda_1 = 1 \text{ \AA}$ и γ -излучения изотопа Cs^{137} с $\lambda_2 = 1,88 \cdot 10^{-2} \text{ \AA}$. Найдите в обоих случаях: а) комptonовский сдвиг $\Delta\lambda$, б) потерю энергии ΔE фотоном при рассеянии.

Решение

При угле рассеяния фотона $\theta = 90^\circ$ комptonовский сдвиг $\Delta\lambda$, согласно формуле (2.19), равен

$$\Delta\lambda = \lambda_K = \frac{h}{mc} = 2,43 \cdot 10^{-12} \text{ м},$$

поскольку $\cos\theta = 0$.

Из закона сохранения энергии (2.10) следует, что энергия ΔE , которую теряет фотон при рассеянии, равна кинетической энергии отдачи электрона T . Используя соотношение между частотой и длиной волны фотона $\omega = 2\pi c/\lambda$ и формулу для кинетической энергии электрона отдачи, полученную в задаче 2.2.8, найдем:

$$\Delta E = T = \frac{\hbar\omega}{1 + \frac{mc^2}{\hbar\omega}} = \frac{2\pi\hbar c\lambda_K}{\lambda(\lambda + \lambda_K)}. \quad (2.32)$$

Подставляя в (2.32) численные значения λ_1 и λ_2 , получим:

$$\Delta E_1 = 0,295 \text{ кэВ} \quad \text{и} \quad \Delta E_2 = 373 \text{ кэВ}.$$

Ответ: $\Delta E_1 = 0,295 \text{ кэВ}$, $\Delta E_2 = 373 \text{ кэВ}$.

Задача 2.2.12. Рассмотрев задачу об излучении фотона при рассеянии электрона на покоящемся ядре, найти коротковолновую границу λ_{\min} тормозного рентгеновского излучения.

Решение

Будем считать, что электрон с начальным импульсом \mathbf{p}_i и энергией $E_i = \sqrt{(mc^2)^2 + (p_i c)^2}$ рассеивается на покоящемся ядре массы M . При рассеянии излучается фотон с импульсом \mathbf{p}_ϕ и энергией $E_\phi = p_\phi c$. При этом ядро приобретает импульс $\mathbf{p}_я$, а его энергия становится равной $E_я = \sqrt{(Mc^2)^2 + (p_я c)^2}$. Импульс электрона после рассеяния равен \mathbf{p}_f , а его энергия $E_f = \sqrt{(mc^2)^2 + (p_f c)^2}$. Тогда законы сохранения энергии и импульса будут иметь вид:

$$E_i + Mc^2 = E_f + E_я + E_\phi, \quad (2.33)$$

$$\mathbf{p}_i = \mathbf{p}_f + \mathbf{p}_я + \mathbf{p}_\phi. \quad (2.34)$$

При минимальной длине волны фотона λ_{\min} его энергия E_ϕ будет максимальной. Из закона сохранения энергии (2.33) видно, что при этом сумма энергий электрона и ядра после рассеяния ($E_f + E_я$) должна быть минимальной. Ситуация аналогична известной задаче о столкновении двух шариков. Конечная механическая энергия системы минимальна при абсолютно неупругом ударе, при этом часть механической энергии, переходящая в тепловую энергию, максимальна. После абсолютно неупругого столкновения шарики движутся дальше с одинаковой скоростью.

Отличие нашей задачи состоит лишь в том, что часть механической энергии электрона и ядра не переходит в тепло, а уносится фотоном. Поэтому энергия E_ϕ фотона будет максимальной, если после столкновения ядро и электрон будут двигаться с одинаковыми скоростями $\mathbf{v}_f = \mathbf{v}_я \equiv \mathbf{V}$. При этом систему «электрон + ядро» мы можем рассматривать как одну частицу массы $(M + m)$ (см. рис. 2.8). Тогда законы сохранения

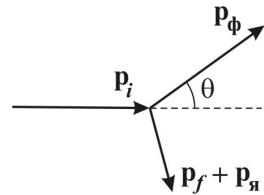


Рис. 2.8. Излучение фотона при рассеянии электрона на ядре.

энергии (2.33) и импульса (2.34) можно переписать в виде:

$$E_i + Mc^2 - E_\phi = E_f + E_\gamma = \frac{(M + m)c^2}{\sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}}}, \quad (2.35)$$

$$\mathbf{p}_i - \mathbf{p}_\phi = \mathbf{p}_f + \mathbf{p}_\gamma = \frac{(M + m)\mathbf{V}}{\sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}}}. \quad (2.36)$$

Возводя (2.35) и (2.36) в квадрат, получим:

$$E_i^2 + (Mc^2)^2 + E_\phi^2 + 2E_iMc^2 - 2E_iE_\phi - 2E_\phi Mc^2 = \frac{(M + m)^2 c^4}{1 - \frac{V^2}{c^2}}, \quad (2.37)$$

$$p_i^2 + p_\phi^2 - 2p_i p_\phi \cos\theta = \frac{(M + m)^2 V^2}{1 - \frac{V^2}{c^2}}, \quad (2.38)$$

где θ – угол между векторами \mathbf{p}_i и \mathbf{p}_ϕ . Вычитая из (2.37) выражение (2.38), умноженное на c^2 , получим

$$E_i Mc^2 - E_\phi Mc^2 - E_\phi (E_i - p_i c \cos\theta) = (Mc^2)(mc^2),$$

откуда

$$\frac{1}{E_\phi} = \frac{1}{E_i - mc^2} \left[1 + \frac{1}{Mc^2} (E_i - p_i c \cos\theta) \right]. \quad (2.39)$$

Вспоминая, что $E_\phi = hc/\lambda$, получим из (2.39) выражение для коротковолновой границы тормозного рентгеновского излучения:

$$\lambda_{\min} = \frac{hc}{E_i - mc^2} \left[1 + \frac{1}{Mc^2} (E_i - p_i c \cos\theta) \right]. \quad (2.40)$$

Замечание. Если считать ядро бесконечно тяжелым $M \rightarrow \infty$, то вторым членом в квадратных скобках выражения (2.40) можно пренебречь, и тогда

$$\lambda_{\min} = \frac{hc}{E_i - mc^2} = \frac{hc}{T} = \frac{hc}{|q_e|U}, \quad (2.41)$$

где U – ускоряющая разность потенциалов. Выражение (2.41) можно получить из формулы Эйнштейна:

$$\hbar\omega = T_{\max} + A_{\text{вых}},$$

если рассматривать тормозное рентгеновское излучение как «фотоэффект наоборот» и пренебречь работой выхода электрона из металла.

$$\text{Ответ: } \lambda_{\min} = \frac{hc}{E_i - mc^2} \left[1 + \frac{1}{Mc^2} (E_i - p_i c \cos\theta) \right].$$

2.3. Короткие задачи

Задача 2.3.1. Известно, что фотоэлектроны, вырываемые с поверхности некоторого металла светом с частотой $\nu_1 = 2,2 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}$, полностью задерживаются обратным потенциалом $U_1 = 6,6 \text{ В}$, а вырываемые светом с частотой $\nu_2 = 4,6 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}$ – потенциалом $U_1 = 16,5 \text{ В}$. По этим данным определите постоянную Планка h .

Решение

Максимальная кинетическая энергия фотоэлектронов T_{\max} равна произведению задерживающего потенциала U и заряда электрона e . Поэтому запишем уравнение Эйнштейна для фотонов с частотами ν_1 и ν_2 в виде:

$$h\nu_1 = eU_1 + A_{\text{вых}}, \quad (2.42)$$

$$h\nu_2 = eU_2 + A_{\text{вых}}, \quad (2.43)$$

где $A_{\text{вых}}$ – работа выхода электрона из металла. Вычитая (2.42) из (2.43), получим:

$$h(\nu_2 - \nu_1) = e(U_2 - U_1),$$

откуда

$$h = e \frac{U_2 - U_1}{\nu_2 - \nu_1} = 1,6 \cdot 10^{-19} \frac{16,5 - 6,6}{(4,6 - 2,2) \cdot 10^{15}} = 6,6 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}.$$

$$\text{Ответ: } h = e \frac{U_2 - U_1}{\nu_2 - \nu_1} = 6,6 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}.$$

Задача 2.3.2. Найти энергию фотона E , длина волны которого равна комптоновской длине волны.

Решение

Энергия фотона связана с его длиной волны соотношением:

$$E = \hbar\omega = \frac{2\pi\hbar c}{\lambda} = \frac{hc}{\lambda}. \quad (2.44)$$

Подставляя в (2.44) комптоновскую длину волны $\lambda_K = h/mc$, получим

$$E = \frac{hc}{\lambda_K} = mc^2 = 511 \text{ кэВ},$$

т.е. энергия фотона с комптоновской длиной волны равна энергии покоя электрона.

Ответ: $E = mc^2 = 511 \text{ кэВ}$.

Задача 2.3.3. Определить энергию фотонов $\hbar\omega$, рассеянных покоящимся свободным электроном на угол $\theta = \pi$ в двух предельных случаях: а) $\hbar\omega_0 \ll mc^2$, б) $\hbar\omega_0 \gg mc^2$.

Решение

Согласно формуле (2.20), энергия рассеянного под углом $\theta = \pi$ фотона равна (см. задачу 2.2.8)

$$\hbar\omega = \frac{\hbar\omega_0}{1 + \frac{2\hbar\omega_0}{mc^2}}. \quad (2.45)$$

Рассмотрим предельные случаи соотношения (2.45). При $\hbar\omega_0 \ll mc^2$ получаем:

$$\hbar\omega = \hbar\omega_0 \left(1 + \frac{2\hbar\omega_0}{mc^2}\right)^{-1} = \hbar\omega_0 \left(1 - \frac{2\hbar\omega_0}{mc^2} + \dots\right) \approx \hbar\omega_0 - 2 \frac{(\hbar\omega_0)^2}{mc^2}.$$

В случае $\hbar\omega_0 \gg mc^2$ получим:

$$\hbar\omega = \frac{mc^2}{2} \left(1 + \frac{mc^2}{2\hbar\omega_0}\right)^{-1} = \frac{mc^2}{2} \left(1 - \frac{mc^2}{2\hbar\omega_0} + \dots\right) \approx \frac{mc^2}{2} - \frac{(mc^2)^2}{4\hbar\omega_0}.$$

Ответ: а) $\hbar\omega \approx \hbar\omega_0 - 2 \frac{(\hbar\omega_0)^2}{mc^2}$, б) $\hbar\omega \approx \frac{mc^2}{2} - \frac{(mc^2)^2}{4\hbar\omega_0}$.

Задача 2.3.4. В эксперименте по измерению интенсивности тормозного рентгеновского излучения получено, что для ускоряющего потенциала $U = 20$ кВ коротковолновая граница излучения равна $\lambda_{\min} = 0,6$ А. Найдите постоянную Планка.

Решение

Согласно результатам задачи 2.2.12, коротковолновую границу тормозного рентгеновского излучения можно оценить по формуле (2.41):

$$\lambda_{\min} = \frac{2\pi\hbar c}{|q_e|U},$$

откуда

$$\hbar = \frac{|q_e|U\lambda_{\min}}{2\pi c} = \frac{1,6 \cdot 10^{-19} \cdot 20 \cdot 10^3 \cdot 0,6 \cdot 10^{-10}}{2 \cdot 3,14 \cdot 3 \cdot 10^8} = 1,02 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}.$$

$$\text{Ответ: } \hbar \approx \frac{|q_e|U\lambda_{\min}}{2\pi c} \approx 1,02 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}.$$

2.4. Задачи для самостоятельного решения

Задача 2.4.1. Найдите, сколько фотонов в секунду излучают:

а) He-Ne лазер ($\lambda = 633$ нм) мощностью $W = 10$ мВт;

б) мобильный телефон мощностью $W = 0,5$ Вт, излучающий на частоте $\nu = 850$ МГц;

в) микроволновая печь мощностью $W = 1$ кВт с частотой излучения $\nu = 2,5$ ГГц.

$$\text{Ответ: } N = \frac{W\Delta t\lambda}{hc} = \frac{W\Delta t}{h\nu}; \text{ а) } N = 3,3 \cdot 10^{16}; \text{ б) } N = 9,2 \cdot 10^{23};$$

$$\text{в) } N = 6,2 \cdot 10^{26}.$$

Задача 2.4.2 (2.2 [1]). С какой скоростью должен двигаться электрон, чтобы его энергия была равна энергии фотона с длиной волны $\lambda = 912$ А?

$$\text{Ответ: } v = \sqrt{\frac{2hc}{m\lambda}} \approx 2,18 \cdot 10^6 \text{ м} \cdot \text{с}^{-1}.$$

Задача 2.4.3 (2.4 [1]). Какой энергией должен обладать фотон, чтобы его импульс был равен импульсу электрона с кинетической энергией а) $T = 100$ эВ; б) $T = 1$ МэВ?

Ответ: а) $\hbar\omega = 10$ кэВ, б) $\hbar\omega = 1,4$ МэВ.

Задача 2.4.4. Металлическая пластина облучается светом с длиной волны $\lambda = 187,5$ нм. Вылетающие из пластины фотоэлектроны попадают в однородное электрическое поле напряжённостью $E = 130$ В/м, причем вектор напряжённости направлен перпендикулярно поверхности пластины. Измерения показали, что на расстоянии $L = 10$ см от пластины максимальная кинетическая энергия фотоэлектронов равна $T_{\max} = 15,9$ эВ. Определите работу выхода $A_{\text{вых}}$ электронов из данного металла.

Ответ: $A_{\text{вых}} = \frac{hc}{\lambda} - T_{\max} + |q_e|EL = 3,7$ эВ.

Задача 2.4.5 (2.12 [1]). Для цезия красная граница фотоэффекта равна $\lambda_{\max} = 6390$ Å. Чему равна максимальная кинетическая энергия фотоэлектронов, если падающее на цезиевый фотокатод излучение имеет длину волны $\lambda = 912$ Å?

Ответ: $T_{\max} = 11,7$ эВ.

Задача 2.4.6 (2.41 [1]). Найти силу F давления излучения Солнца на Землю, считая, что всё излучение поглощается.

Ответ: $F \approx 1,33 \cdot 10^3$ кг.

Задача 2.4.7. Интенсивность излучения Солнца на расстоянии r от него равна I . Найти радиус R шарика, уравновешенного силами гравитационного притяжения и давления света. Плотность шарика ρ , масса Солнца M . Зависит ли ответ от расстояния r до Солнца?

Ответ: $R = \frac{3}{4} \frac{Ir^2}{cGMr}$; не зависит, так как $Ir^2 = \text{const}$.

Задача 2.4.8 (2.47 [1]). При аннигиляции нерелятивистской электрон-позитронной пары образовалось два фотона. Определить направления их вылета и длины волн.

Ответ: $\lambda = \lambda_K = 2,43 \cdot 10^{-12}$ м; фотоны разлетаются в противоположных направлениях.

Задача 2.4.9. Оцените, какая часть энергии η теряется фотоном при комптоновском рассеянии на угол $\theta = 90^\circ$

а) для видимого света с длиной волны $\lambda = 550$ нм ;

б) для γ -излучения с энергией $\hbar\omega = 1$ МэВ.

Ответ: $\eta = \frac{\lambda_K}{\lambda_K + \lambda}$; а) $\eta = 10^{-5}$; б) $\eta = 0,67$.

Задача 2.4.10 (2.21 [1]). Определить величину комптоновского смещения $\Delta\lambda$, если начальная длина волны фотона $\lambda_0 = 0,0242$ Å, а скорость электрона отдачи определяется соотношением $\beta = v/c = 0,6$.

Ответ:
$$\Delta\lambda = \frac{\lambda_K}{1 + \frac{\lambda_K}{\lambda_0} - \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}} - \lambda_0 = 0,008 \text{ Å}.$$

Задача 2.4.11 (2.36 [1]). Найти энергию фотона $\hbar\omega$ после рассеяния на электроне, двигавшемся навстречу фотону со скоростью v_0 . Рассмотреть предел $v_0 \rightarrow c$ при рассеянии фотона назад.

Ответ:
$$\hbar\omega = \frac{(1 + \beta_0)\hbar\omega_0}{1 + \beta_0 \cos\theta + \frac{\hbar\omega_0}{mc^2}(1 - \cos\theta)\sqrt{1 - \beta_0^2}}, \text{ где } \beta_0 = \frac{v_0}{c};$$

$$\hbar\omega \rightarrow \frac{mc^2}{\sqrt{1 - \beta_0^2}}, \text{ при } \beta_0 \rightarrow 1.$$

Задача 2.4.12. При увеличении напряжения на рентгеновской трубке в $\eta = 1,5$ раза коротковолновая граница сплошного рентгеновского спектра изменилась на $\Delta\lambda = 26$ пм. Найти первоначальное напряжение на трубке.

Ответ:
$$U = \left(1 - \frac{1}{\eta}\right) \frac{hc}{|q_e| \Delta\lambda} = 16 \text{ кВ}.$$

Задача 2.4.13 (2.6 [1]). Оцените угол отклонения θ фотона при пролете вблизи края Солнца. Масса солнца $M = 2 \cdot 10^{30}$ кг, радиус Солнца $R = 7 \cdot 10^8$ м. При решении задачи считать, что фотон обладает «массой» $m = \hbar\omega/c^2$.

Ответ: $\theta \approx \frac{2GM}{c^2 R} \approx 4,3 \cdot 10^{-6}$.

Список литературы

1. Сборник задач по атомной физике. Под ред. С.С. Красильникова, А.М. Попова, О.В. Тихоновой. – М.: Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, 2010. – 217 с.
2. Мессиа А. Квантовая механика. Том 1. – М.: Наука, 1978. – 480 с.

ГЛАВА 3 ВОЛНА ДЕ БРОЙЛЯ. СООТНОШЕНИЯ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТЕЙ

3.1. Теоретический материал

1. Волна де Бройля. Согласно гипотезе де Бройля, каждой свободной частице можно поставить в соответствие волну (волновую функцию свободной частицы)

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \text{const} \cdot \exp\left(\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\mathbf{r} - Et)\right),$$

где \mathbf{p} – вектор импульса частицы, E – её энергия (в релятивистском случае) или кинетическая энергия (в нерелятивистском случае). Волновая функция является комплексной функцией, физический смысл которой заключается в том, что квадрат её модуля $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ равен плотности вероятности $\rho(\mathbf{r}, t)$ обнаружения частицы в окрестности точки с радиус-вектором \mathbf{r} в момент времени t . Фаза волновой функции имеет отдельный физический смысл.

С математической точки зрения волна де Бройля является обычной плоской волной $\text{const} \cdot \exp(i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t))$, где волновой вектор \mathbf{k} и частота ω связаны с импульсом и энергией свободной частицы соотношениями де Бройля:

$$\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} \quad \text{и} \quad E = \hbar\omega.$$

Длина волны де Бройля λ равна

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{h}{p}. \quad (3.1)$$

2. Соотношения неопределенностей для координаты и импульса. Из определения волны де Бройля следует, что частица с определенным импульсом \mathbf{p} может с равной вероятностью находиться в любой точке пространства: $\rho(\mathbf{r}, t) = \text{const}$. Частица, локализованная в некоторой области пространства $\Delta V = \Delta x \Delta y \Delta z$, может быть описана волновым пакетом, собранным из волн де Бройля с различными импульсами. В этом случае частица будет характеризоваться неопределенностью значения импульса Δp .

Можно показать, что

$$\Delta p_x \cdot \Delta x \geq \hbar, \quad \Delta p_y \cdot \Delta y \geq \hbar, \quad \Delta p_z \cdot \Delta z \geq \hbar.$$

Эти соотношения называются соотношениями неопределенностей Гейзенберга для координаты и импульса. Их физический смысл заключается в невозможности одновременного измерения проекции радиус-вектора и импульса частицы на одну и ту же ось. В более точной форме соотношения неопределенностей записываются в виде:

$$\delta p_x \cdot \delta x \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \delta p_y \cdot \delta y \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \delta p_z \cdot \delta z \geq \frac{\hbar}{2},$$

где δp_x , δp_y , δp_z и δx , δy , δz – среднеквадратичные отклонения проекций импульса и радиус-вектора соответственно.

3. Релятивистская механика. Напомним некоторые полезные формулы релятивистской механики материальной точки. Импульс и энергия свободной релятивистской частицы, движущейся со скоростью v , равны

$$\mathbf{p} = \frac{m\mathbf{v}}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad \text{и} \quad E = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}},$$

где m – масса частицы, c – скорость света. Энергия и импульс частицы связаны между собой соотношением:

$$E^2 = (mc^2)^2 + (pc)^2.$$

Кинетическая энергия частицы равна

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

Если скорость частицы мала по сравнению со скоростью света ($v \ll c$), то частица называется *нерелятивистской*. Если скорость частицы близка к скорости света ($c - v \ll c$), частица называется *ультрарелятивистской*. Отдельно отметим случай безмассовых частиц, для которых $v = c$ и $E = pc$.

3.2. Задачи с решениями

Задача 3.2.1. Известно, что длина волны де Бройля электрона в n раз меньше его комптоновской длины волны. Найти кинетическую энергию электрона. Рассмотреть предельные случаи $n \gg 1$ и $n \ll 1$.

Решение

По определению длина волны де Бройля равна $\lambda = \frac{h}{p}$, а комптоновская длина волны электрона равна $\lambda_K = \frac{h}{mc}$, где p – импульс электрона, m – его масса. По условию задачи $\lambda = \frac{\lambda_K}{n}$, поэтому $p = nmc$. Кинетическая энергия электрона равна

$$T = \sqrt{(mc^2)^2 + (pc)^2} - mc^2 = \left(\sqrt{n^2 + 1} - 1\right) mc^2.$$

Если $n \ll 1$ (т.е. $\lambda \gg \lambda_K$, нерелятивистское приближение), то

$$T \approx \frac{1}{2} n^2 mc^2.$$

В другом предельном случае $n \gg 1$ (т.е. $\lambda \ll \lambda_K$, ультрарелятивистское приближение) имеем

$$T = nmc^2.$$

Ответ: $T = \left(\sqrt{n^2 + 1} - 1\right) mc^2$; $T \approx \frac{1}{2} n^2 mc^2$ ($\lambda \gg \lambda_K$); $T = nmc^2$ ($\lambda \ll \lambda_K$).

Задача 3.2.2. Найти длины волн де Бройля для протона и электрона, ускоренных до кинетической энергии 10 МэВ.

Решение

В общем случае длина волны де Бройля релятивистской частицы равна

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{hc}{\sqrt{E^2 - (mc^2)^2}} = \frac{hc}{\sqrt{T^2 + 2Tmc^2}},$$

где E – энергия и $T = E - mc^2$ – кинетическая энергии частицы. Однако в условиях данной задачи последнюю формулу можно упростить. Поскольку для протона $m_p c^2 \gg 10$ МэВ, можно использовать нерелятивистское приближение:

$$\lambda_p \approx \frac{hc}{\sqrt{2(m_p c^2)T}} \approx \frac{6,63 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^8}{\sqrt{2 \cdot 938 \cdot 10 \cdot 1,6 \cdot 10^{-13}}} \approx 9,1 \cdot 10^{-15} \text{ м},$$

а для электрона ($m_e c^2 \ll 10$ МэВ) – ультрарелятивистское приближение:

$$\lambda_e = \frac{hc}{T} \approx \frac{6,63 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^8}{1,6 \cdot 10^{-12}} \approx 1,2 \cdot 10^{-13} \text{ м.}$$

Ответ: $\lambda_p \approx \frac{hc}{\sqrt{2(m_p c^2)T}} \approx 9,1 \cdot 10^{-15} \text{ м}$ и $\lambda_e = \frac{hc}{T} \approx 1,2 \cdot 10^{-13} \text{ м.}$

Задача 3.2.3. На какую кинетическую энергию должны быть рассчитаны ускорители электронов и протонов, чтобы исследовать структуру атомного ядра.

Решение

Атомное ядро имеет радиус $R \approx 10^{-15}$ м. Чтобы исследовать его структуру, длина волны де Бройля падающих на него частиц должна быть не больше его размеров. Будем считать, что $\lambda = R$. В этом случае кинетическая энергия налетающих на атом частиц равна

$$T = \sqrt{(mc^2)^2 + (pc)^2} - mc^2 = mc^2 \left(\sqrt{1 + \frac{h^2}{R^2 m^2 c^2}} - 1 \right).$$

Таким образом, ускоритель электронов должен быть рассчитан на кинетическую энергию

$$T_e = mc^2 \left(\sqrt{1 + \frac{h^2}{R^2 m_e^2 c^2}} - 1 \right) \approx m_e c^2 \cdot 2,4 \cdot 10^3 \approx 1,2 \text{ ГэВ,}$$

а ускоритель протонов – на кинетическую энергию

$$T_p = m_p c^2 \left(\sqrt{1 + \frac{h^2}{R^2 m_p^2 c^2}} - 1 \right) \approx m_p c^2 \cdot 0,64 \approx 0,6 \text{ ГэВ.}$$

Таким образом, использовать ускорители протонов для изучения структуры атомного ядра оказывается выгоднее с энергетической точки зрения.

Ответ: $T = mc^2 \left(\sqrt{1 + \frac{h^2}{R^2 m^2 c^2}} - 1 \right)$, $T_e \approx 1,2 \text{ ГэВ}$, $T_p \approx 0,6 \text{ ГэВ}$.

Задача 3.2.4. Свободная частица массой m движется со скоростью v . Найти фазовую и групповую скорость волнового пакета, характеризующего эту частицу. Рассмотреть релятивистский и нерелятивистский случаи.

Решение

Волновая функция свободной частицы (волна де Бройля) как в релятивистском, так и в нерелятивистском случае имеет вид

$$\Psi(x, t) = \text{const} \cdot \exp\left(\frac{i}{\hbar}(px - Et)\right),$$

где p – импульс частицы, а E – либо энергия частицы ($E = \sqrt{(mc^2)^2 + (pc)^2}$), если речь идет о волне де Бройля в релятивистском случае ($\Psi_{\text{рел}}$), либо кинетическая энергия частицы

($E = \frac{p^2}{2m}$) в нерелятивистском случае ($\Psi_{\text{нерел}}$). Ось x направлена

вдоль направления движения частицы.

Релятивистский случай. Фазовая скорость волнового пакета равна

$$v_{\text{фаз}} = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{p} = \frac{c}{p} \sqrt{m^2 c^2 + p^2}. \quad (3.2)$$

Групповая скорость волнового пакета:

$$v_{\text{гр}} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{dp} = \frac{pc}{\sqrt{m^2 c^2 + p^2}}. \quad (3.3)$$

Импульс релятивистской частицы, движущейся со скоростью v ,

равен $p = \frac{mv}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$, откуда

$$v = \frac{pc}{\sqrt{m^2 c^2 + p^2}}. \quad (3.4)$$

Сравнивая (3.4) с (3.2) и (3.3), получим:

$$v_{\text{фаз}} = \frac{c^2}{v} \quad \text{и} \quad v_{\text{гр}} = v.$$

В нерелятивистском случае $p = mv$, поэтому

$$v_{\text{фаз}} = \frac{E}{p} = \frac{p}{2m} = \frac{v}{2}, \quad v_{\text{гр}} = \frac{dE}{dp} = \frac{p}{m} = v.$$

Мы видим, что в обоих случаях групповая скорость волнового пакета, собранного из волн де Бройля, совпадает со скоростью частицы.

Замечание. В пределе $v \ll c$ волновая функция $\Psi_{\text{рел}}$ не переходит в $\Psi_{\text{нерел}}$:

$$\Psi_{\text{рел}}(x, t) \approx \Psi_{\text{нерел}}(x, t) \cdot \exp\left(-\frac{i}{\hbar} mc^2 t\right).$$

Однако экспоненциальный множитель не даёт вклада ни в плотность вероятности (его модуль равен единице), ни в плотность потока вероятности (поскольку не зависит от пространственных координат), ни в групповую скорость волнового пакета (поскольку не зависит от импульса частицы). Этот множитель, конечно, даёт вклад в фазовую скорость волнового пакета, а именно:

$$v_{\text{фаз}} = \frac{E}{p} = \frac{v}{2} + \frac{c^2}{v} \approx \frac{c^2}{v}, \text{ что согласуется с результатом для релятивистской частицы.}$$

Но фазовая скорость волнового пакета не является наблюдаемой величиной, и её величина не принципиальна для построения физической теории. Поэтому в нерелятивистском приближении множитель, связанный с энергией покоя частицы, просто не учитывается.

Ответ: В релятивистском случае $v_{\text{фаз}} = \frac{c^2}{v}$ и $v_{\text{гр}} = v$; в

нерелятивистском случае $v_{\text{фаз}} = \frac{v}{2}$ и $v_{\text{гр}} = v$.

Задача 3.2.5. Свободная нерелятивистская частица с энергией E движется из минус бесконечности в положительном направлении оси x . В точке $x=0$ потенциальная энергия меняется скачком и становится равной αE ($\alpha < 1$). Определить, во сколько раз при этом изменяется длина волны де Бройля частицы.

Решение

В связи с тем, что на частицу не действуют силы ($\mathbf{F} = -\nabla U(\mathbf{r}) = -\nabla(\text{const}) = 0$, при $x \neq 0$), она как при $x < 0$, так и при $x > 0$ является свободной и описывается обычной волной де Бройля. Согласно (3.1), длина волны де Бройля при $x < 0$ равна

$$\lambda_1 = \frac{h}{p_1} = \frac{h}{\sqrt{2mE}},$$

а при $x > 0$ –

$$\lambda_2 = \frac{h}{p_2} = \frac{h}{\sqrt{2mE(1-\alpha)}}.$$

При переходе в область $x > 0$ длина волны де Бройля частицы изменяется в

$$\frac{\lambda_2}{\lambda_1} = \frac{1}{\sqrt{1-\alpha}} \text{ раз.} \quad (3.5)$$

Из (3.5) видно, что при $\alpha < 0$ длина волны де Бройля при переходе в область $x > 0$ уменьшается, а при $0 < \alpha < 1$ – увеличивается.

Ответ: $\frac{\lambda_2}{\lambda_1} = \frac{1}{\sqrt{1-\alpha}}$ раз.

Задача 3.2.6. Показать, что волновая функция свободной нерелятивистской частицы (волна де Бройля) удовлетворяет уравнению: $i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\mathbf{r}, t)$ (уравнение Шредингера для свободной частицы).

Решение

В правую и левую части уравнения Шредингера для свободной частицы подставим волну де Бройля

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \text{const} \cdot \exp\left(\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\mathbf{r} - Et)\right).$$

Для левой части уравнения получим:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left[\text{const} \cdot \exp\left(\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\mathbf{r} - Et)\right) \right] = i\hbar \cdot \left(-\frac{iE}{\hbar}\right) \cdot \Psi(\mathbf{r}, t) = E\Psi(\mathbf{r}, t).$$

Для правой части уравнения:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \left[\text{const} \cdot \exp\left(\frac{i}{\hbar}(p_x x + p_y y + p_z z - Et)\right) \right] = \\ = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) \cdot \Psi(\mathbf{r}, t) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \Psi(\mathbf{r}, t) = E\Psi(\mathbf{r}, t). \end{aligned}$$

Равенство левой и правой частей уравнения Шредингера для свободной частицы показывает, что волна де Бройля является его решением.

Задача 3.2.7. Используя выражение для волновой функции свободной релятивистской частицы (волна де Бройля), получить волновое уравнение для свободной релятивистской частицы массой m .

Решение

Рассмотрим вначале *одномерный случай*. Для записи волнового уравнения вычислим вторые производные по времени t и координате x от волновой функции свободной частицы

$$\Psi(x, t) = \text{const} \cdot \exp\left(\frac{i}{\hbar}(px - Et)\right):$$

$$\frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial t^2} = \left(-\frac{iE}{\hbar}\right)^2 \Psi(x, t) = -\frac{E^2}{\hbar^2} \Psi(x, t) \quad (3.6)$$

и

$$\frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} = \left(\frac{ip}{\hbar}\right)^2 \Psi(x, t) = -\frac{p^2}{\hbar^2} \Psi(x, t). \quad (3.7)$$

Энергия и импульс релятивистской частицы связаны соотношением $E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4$. Умножая левую и правую части этого соотношения на $\left(-\frac{\Psi(x, t)}{\hbar^2}\right)$, получим:

$$-\frac{E^2}{\hbar^2} \Psi(x, t) = -\frac{p^2}{\hbar^2} \Psi(x, t) \cdot c^2 - \frac{m^2 c^4}{\hbar^2} \Psi(x, t). \quad (3.8)$$

Подставляя в (3.8) $-\frac{E^2}{\hbar^2} \Psi(x, t)$ из (3.6) и $-\frac{p^2}{\hbar^2} \Psi(x, t)$ из (3.7), получим волновое уравнение для свободной релятивистской частицы в *одномерном случае*:

$$\frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial t^2} - c^2 \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} = -\frac{m^2 c^4}{\hbar^2} \Psi(x, t). \quad (3.9)$$

Трёхмерный случай. Уравнение (3.9) можно обобщить на трёхмерный случай, заменив вторую производную $\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2}$ на оператор Лапласа $\Delta \Psi(\mathbf{r}, t)$:

$$\frac{\partial^2 \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2} - c^2 \Delta \Psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{m^2 c^4}{\hbar^2} \Psi(\mathbf{r}, t).$$

Это уравнение называется *уравнением Клейна–Гордона*. В литературе часто это уравнение записывается в следующем виде:

$$\square \Psi(\mathbf{r}, t) = -\left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2 \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (3.10)$$

где $\square = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta$ – оператор Даламбера. Для системы единиц, в которой $\hbar = c = 1$, уравнение (3.10) принимает более компактный вид

$$(\square + m^2) \Psi = 0. \quad (3.11)$$

Замечание. В случае $m = 0$ уравнение Клейна–Гордона имеет вид обычного волнового уравнения, которому удовлетворяют скалярный и векторный потенциал электромагнитного поля. При этом при квантовании электромагнитного поля векторный потенциал $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ играет роль «волновых функций» фотона.

Ответ:
$$\frac{\partial^2 \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2} - c^2 \Delta \Psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{m^2 c^4}{\hbar^2} \Psi(\mathbf{r}, t).$$

Задача 3.2.8. Используя соотношение неопределенностей, оценить энергию основного состояния и размер атома водорода.

Решение

Если считать ядро атома водорода неподвижным, то энергия электрона в атоме водорода равна

$$E(p, r) = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r}, \quad \text{где } e^2 = \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0}. \quad (3.12)$$

Здесь q_e – заряд, p – импульс и m – масса электрона, r – расстояние до ядра, ϵ_0 – электрическая постоянная. Запишем соотношение неопределенностей в виде $\Delta p \cdot \Delta r \approx \hbar$ и будем считать, что для электрона в основном состоянии атома водорода справедливо

$p \approx \Delta p$ и $r \approx \Delta r$. Тогда из соотношения неопределенностей следует, что $p \approx \frac{\hbar}{r}$. Подставляя это выражение для импульса в (3.12), получим:

$$E(r) = \frac{\hbar^2}{2mr^2} - \frac{e^2}{r}. \quad (3.13)$$

Основному состоянию атома водорода соответствует минимум энергии $E(r)$, который легко найти, дифференцируя (3.13) по r :

$$\frac{dE}{dr} = -\frac{\hbar^2}{mr^3} + \frac{e^2}{r^2} = 0. \quad (3.14)$$

Из (3.14) находим оценочное значение радиуса атома водорода:

$$r = \frac{\hbar^2}{me^2} \approx 0.529 \text{ \AA}.$$

Подставляя r в (3.13), находим минимум энергии, который соответствует основному состоянию атома водорода:

$$E_{\min} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{me^2}{\hbar^2} \right)^2 - e^2 \frac{me^2}{\hbar^2} = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \approx -13,6 \text{ эВ}.$$

Замечание. Предложенный метод решения задачи позволяет получить оценку r и E_{\min} только по порядку величины.

$$\text{Ответ: } E_{\min} = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \approx -13,6 \text{ эВ}, \quad r = \frac{\hbar^2}{me^2} \approx 0,529 \text{ \AA},$$

$$\text{где } e^2 = \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0}.$$

Задача 3.2.9. Используя соотношение неопределенностей, оценить энергию основного состояния гармонического осциллятора E_{\min} с частотой колебаний ω .

Решение

Энергия гармонического осциллятора равна

$$E(p, x) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}, \quad (3.15)$$

где m – масса частицы. Запишем соотношение неопределенностей в виде $\delta p \cdot \delta x \geq \frac{\hbar}{2}$ и будем считать, что в основном состоянии

импульс $p \approx \delta p$ и координата $x \approx \delta x$. Тогда $p \approx \frac{\hbar}{2x}$, и (3.15) преобразуется к виду:

$$E(x) = \frac{\hbar^2}{8mx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}. \quad (3.16)$$

Дифференцируя (3.16) по x , получим:

$$\frac{dE}{dx} = -\frac{\hbar^2}{4mx^3} + m\omega^2 x = 0,$$

откуда $x_{\min} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$. Подставляя x_{\min} в (3.16), найдем энергию основного состояния гармонического осциллятора (энергию нулевых колебаний):

$$E_{\min} = \frac{\hbar^2}{8m} \left(\frac{2m\omega}{\hbar} \right) + \frac{m\omega^2}{2} \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right) = \frac{\hbar\omega}{2}.$$

Ответ: $E_{\min} = \frac{\hbar\omega}{2}.$

Задача 3.2.10. Ширина волнового пакета, описывающего свободный нерелятивистский электрон, увеличилась в $n=10$ раз за время $\tau \approx 10^{-15}$ с. Используя соотношение неопределенностей, найти начальную ширину волнового пакета.

Решение

Пусть начальная ширина волнового пакета равна Δx_0 . Тогда из соотношения неопределенностей $\Delta p_0 \cdot \Delta x_0 = m_e \Delta v_0 \cdot \Delta x_0 \approx \hbar$ можно найти разброс скоростей Δv_0 в начальный момент времени:

$$\Delta v_0 \approx \frac{\hbar}{m_e \Delta x_0}.$$

По условию задачи конечная ширина волнового пакета равна $\Delta x = n\Delta x_0$. С другой стороны, если пренебречь начальной шириной волнового пакета по сравнению с конечной ($\Delta x \gg \Delta x_0$), то $\Delta x = \Delta v_0 \cdot \tau$. Отсюда получим уравнение

$$n\Delta x_0 \approx \frac{\hbar\tau}{m_e \Delta x_0},$$

из которого

$$\Delta x_0 \approx \sqrt{\frac{\hbar\tau}{nm_e}} = \sqrt{\frac{1.06 \cdot 10^{-34} \cdot 10^{-15}}{10 \cdot 9.1 \cdot 10^{-31}}} \approx 10^{-10} \text{ м} = 1 \text{ \AA}.$$

Ответ: $\Delta x_0 \approx \sqrt{\frac{\hbar\tau}{nm_e}} \approx 1 \text{ \AA}.$

Задача 3.2.11. Параллельный пучок электронов, движущихся со скоростью $v = 1,5 \cdot 10^6$ м/с, проходит через узкую щель и падает нормально на экран, расположенный на расстоянии $L = 0,1$ м от щели. Определить ширину щели d , при которой ширина её изображения на экране будет минимальной.

Решение

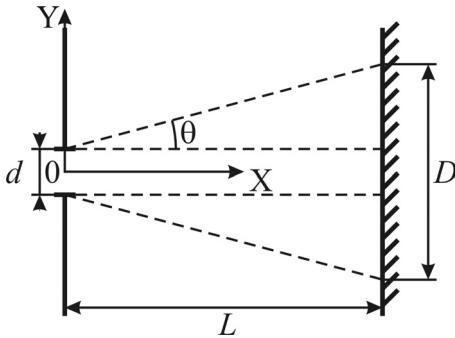


Рис. 3.1. Схематическое изображение дифракции электронов на щели.

Оценим сначала угол θ дифракции электронов на щели ширины d . Это можно сделать двумя способами. Во-первых, это можно сделать, используя соотношение неопределенностей. Направим ось OX вдоль начального направления движения электронов, и ось OY перпендикулярно узкой щели в плоскости экрана (см. рис. 3.1). До попадания в щель

электрон обладает импульсом $\mathbf{p} = (mv, 0, 0)$ (при этом положение электрона в пространстве не определено). При прохождении щели неопределенность координаты y электрона уменьшается до $\Delta y = d$,

и у электрона появляется неопределенность в импульсе $\Delta p_y \approx \frac{\hbar}{d}$.

Полагая $\Delta p_y \ll mv$, можно оценить угол дифракции электронов по формуле

$$\theta \approx \operatorname{tg} \theta \approx \frac{\Delta p_y}{mv} \approx \frac{\hbar}{d \cdot mv} \approx \frac{\lambda}{d},$$

где λ – длина волны де Бройля электрона.

Другой, более формальный подход к решению этой задачи основан на том, что волновая функция свободного электрона (до попадания на щель) представляет собой плоскую волну и с точностью до нормировочного множителя совпадает с выражением для векторного потенциала плоской электромагнитной волны (как уже упоминалось в задаче 3.2.7, при квантовании электромагнитного поля векторный потенциал $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ играет роль «волновых функций» фотона). Поэтому решение задачи о дифракции электронов на щели полностью совпадает с известным из курса оптики решением задачи о дифракции Фраунгофера на щели. При этом вероятность P попадания электрона в ту или иную точку экрана с точностью до множителя равна интенсивности света в задаче о дифракции Фраунгофера. Поэтому первый дифракционный минимум виден из щели под углом $\theta = \frac{\lambda}{d}$.

Если под шириной изображения D понимать расстояние между первыми дифракционными минимумами, то

$$D(d) = d + 2L \cdot \operatorname{tg} \theta \approx d + \frac{2\lambda L}{d}.$$

Дифференцируя последнее выражение по d , найдем ширину щели, при которой ширина изображения минимальна

$$\frac{dD}{dd} = 1 - \frac{2\lambda L}{d^2} = 0,$$

откуда

$$d_{\min} = \sqrt{2\lambda L} = \sqrt{\frac{2hL}{mv}} = \sqrt{\frac{2 \cdot 6.63 \cdot 10^{-34} \cdot 0.1}{9.1 \cdot 10^{-31} \cdot 1.5 \cdot 10^6}} \approx 10^{-5} \text{ м.}$$

Ответ: $d_{\min} = \sqrt{\frac{2hL}{mv}} \approx 10^{-5} \text{ м.}$

Задача 3.2.12. Пучок электронов, ускоренных разностью потенциалов $U = 500 \text{ кВ}$, падает на тонкую поликристаллическую фольгу. На экране, отстоящем от фольги на $L = 20 \text{ см}$, наблюдается дифракционная картина в виде колец. Определить период кри-

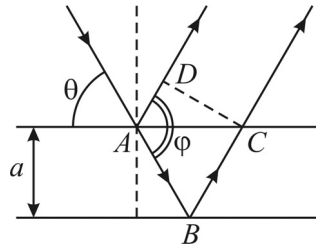


Рис. 3.2. Схематическое изображение дифракции электронов в кристалле.

сталлической решетки материала фольги, если радиус первого кольца равен $r_1 = 0,8$ мм.

Решение

Рассмотрим сначала дифракцию частиц – электронов на *монокристалле*. Будем считать, что расстояние между атомными слоями совпадает с постоянной решетки a . Тогда разность хода между двумя «лучами», отраженными от соседних атомных плоскостей (см. рис. 3.2), равна

$$\Delta = l_{ABC} - l_{AD} = \frac{2a}{\sin \theta} - \frac{2a}{\sin \theta} \cos^2 \theta = 2a \sin \theta,$$

где θ – угол скольжения. Чтобы эти «лучи» усиливали друг друга, необходимо, чтобы $\Delta = n\lambda$, где n – натуральное число, λ – длина волны де Бройля частицы. Таким образом, получаем формулу Вульфа–Брегга

$$2a \sin \theta_n = n\lambda.$$

Поликристаллическая фольга состоит из маленьких хаотически

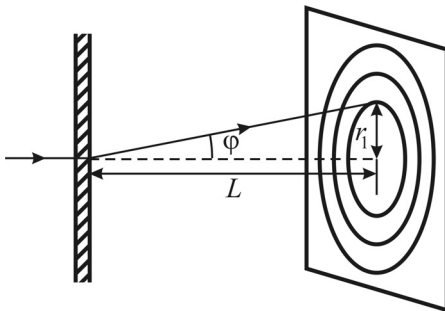


Рис. 3.3. Схематическое изображение дифракции электронов на поликристаллической фольге.

ориентированных монокристалликов. Поэтому при падении пучка электронов на такую фольгу для некоторой части монокристалликов будет выполняться условие Вульфа–Брегга, причем угол рассеяния φ будет равен удвоенному углу скольжения θ (см. рис. 3.2). Поскольку задача симметрична относительно поворотов вокруг

оси пучка, то на экране будут наблюдаться дифракционные кольца. Радиус первого кольца (см. рис. 3.3) равен

$$r_1 = L \operatorname{tg}(2\theta_1) \approx 2L\theta_1 \approx \frac{L\lambda}{a},$$

Поэтому при $\theta_1 \ll 1$:

$$a = \frac{L\lambda}{r_1}. \quad (3.17)$$

Согласно условию задачи, падающие на фольгу электроны – релятивистские, поэтому кинетическая энергия электрона после прохождения разности потенциалов U равна

$$T = \sqrt{(pc)^2 + (mc^2)^2} - mc^2 = |q_e|U. \quad (3.18)$$

Из равенства (3.18) получаем

$$p = \sqrt{2m|q_e|U} \sqrt{1 + \frac{|q_e|U}{2mc^2}}. \quad (3.19)$$

С учетом (3.19), для падающего на поликристаллическую фольгу электрона длина волны де Бройля равна

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m|q_e|U} \sqrt{1 + \frac{|q_e|U}{2mc^2}}} \quad (3.20)$$

Подставляя в (3.17) λ из (3.20), получим:

$$\begin{aligned} a &= \frac{L}{r_1} \frac{h}{\sqrt{2m|q_e|U}} \sqrt{\frac{2mc^2}{2mc^2 + |q_e|U}} = \\ &= \frac{0,2}{8 \cdot 10^{-4}} \frac{6,63 \cdot 10^{-34}}{\sqrt{2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} \cdot 5 \cdot 10^5}} \sqrt{\frac{2 \cdot 511}{2 \cdot 511 + 500}} \approx 3,5 \cdot 10^{-10} \text{ м} \end{aligned}$$

$$\text{Ответ: } a = \frac{L}{r_1} \frac{h}{\sqrt{2m|q_e|U}} \sqrt{\frac{2mc^2}{2mc^2 + |q_e|U}} \approx 3,5 \cdot 10^{-10} \text{ м}.$$

3.3. Короткие задачи

Задача 3.3.1. Чему равна длина волны де Бройля частицы, движущейся со скоростью, которая в десять раз меньше скорости света? Сделать оценки для электрона ($m_e c^2 = 0,511$ МэВ), протона ($m_p c^2 = 938$ МэВ) и Z-бозона ($m_Z c^2 = 91,2$ ГэВ).

Решение

Перепишем формулу (3.1) для длины волны де Бройля в следующем виде:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{hc}{mc^2 v}.$$

Подставляя $c/v = 10$ и $hc = 1,24 \cdot 10^{-6}$ эВ·м, получим:

$$\lambda = \frac{1,24 \cdot 10^{-5} \text{ эВ} \cdot \text{м}}{mc^2}. \quad (3.21)$$

Проведем оценку λ для электрона ($m_e c^2 = 0,511$ МэВ), протона ($m_p c^2 = 938$ МэВ) и Z-бозона ($m_Z c^2 = 91,2$ ГэВ). Из (3.21) получим: $\lambda_e = 2,4 \cdot 10^{-11}$ м, $\lambda_p = 1,3 \cdot 10^{-14}$ м и $\lambda_Z = 1,4 \cdot 10^{-16}$ м.

Ответ: $\lambda = \frac{1,24 \cdot 10^{-5} \text{ эВ} \cdot \text{м}}{mc^2}$, $\lambda_e = 2,4 \cdot 10^{-11}$ м, $\lambda_p = 1,3 \cdot 10^{-14}$ м,
 $\lambda_Z = 1,4 \cdot 10^{-16}$ м.

Задача 3.3.2. Оценить температуру T , при которой длина волны де Бройля атомов гелия имеет порядок 1 Å.

Решение

Длина волны де Бройля нерелятивистской частицы равна $\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_{\text{He}}E_K}}$, где её кинетическая энергия E_K по порядку величины равна $E_K \approx kT$. Следовательно,

$$T \approx \frac{h^2}{2m_{\text{He}}k\lambda^2} \approx 5,6 \text{ К}.$$

Ответ: $T \approx \frac{h^2}{2mk\lambda^2} \approx 5,6 \text{ К}.$

Задача 3.3.3. Для свободной нерелятивистской частицы массы m длина волны де Бройля в лабораторной системе отсчета равна λ . Найти длину волны де Бройля λ_1 для той же частицы в системе отсчета, движущейся навстречу частице со скоростью $v_0 \ll c$.

Решение

В лабораторной системе отсчета импульс частицы равен $mv = \frac{h}{\lambda}$, где v – скорость частицы в лабораторной системе отсчета. Скорость частицы в движущейся системе отсчета равна $v_1 = v + v_0$, поэтому

$$\lambda_1 = \frac{h}{mv_1} = \frac{h}{mv + mv_0} = \frac{\lambda}{1 + \frac{mv_0\lambda}{h}}.$$

Ответ: $\lambda_1 = \frac{\lambda}{1 + mv_0\lambda/h}.$

Задача 3.3.4. Используя соотношение неопределенностей, оцените кинетическую энергию электрона, локализованного в пространственной области размером $L = 1 \text{ \AA}$.

Решение

Используя соотношение неопределенностей Гейзенберга в виде $pL \approx \hbar$, получим:

$$T = \frac{p^2}{2m} \approx \frac{\hbar^2}{2mL^2} = \frac{(1,06 \cdot 10^{-34})^2}{2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot (10^{-10})^2} = 6,1 \cdot 10^{-19} \text{ Дж} = 3,8 \text{ эВ}.$$

Ответ: $T \approx \frac{\hbar^2}{2mL^2} = 3,8 \text{ эВ}.$

3.4. Задачи для самостоятельного решения

Задача 3.4.1 (3.2 [1]). Найти длину волны де Бройля λ фотоэлектрона, если известно, что она совпадает с длиной волны падающего на катод электромагнитного излучения. Работа выхода материала катода $A = 5 \text{ эВ}$. Фотоэлектрон считать нерелятивистским.

Ответ: $\lambda = \frac{2\pi\hbar c}{A} \approx 2,5 \cdot 10^{-7} \text{ м}.$

Задача 3.4.2 (3.3 [1]). Определить длину волны де Бройля, соответствующую среднеквадратичной скорости атомов идеального одноатомного газа с молярной массой μ при температуре T . Сделать численные оценки для гелия и неона при комнатной температуре.

Ответ: $\lambda = \frac{2\pi\hbar N_A}{\sqrt{3\mu RT}}, \lambda_{\text{He}} = 7,3 \cdot 10^{-11} \text{ м}, \lambda_{\text{Ne}} = 3,2 \cdot 10^{-11} \text{ м}.$

Задача 3.4.3 (D2.2 [2]). Получить распределение молекул по

длинам волн де Бройля из распределения Максвелла для молекул идеального газа по модулю скорости.

$$\text{Ответ: } f(\lambda) = \frac{4\pi}{\lambda} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mkT\lambda^2} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{2\pi^2\hbar^2}{mkT\lambda^2} \right).$$

Задача 3.4.4 (3.6 [1]). Определить длину волны де Бройля λ электронов, падающих на антикатод рентгеновской трубки, если известно, что коротковолновая граница спектра рентгеновского излучения $\lambda_{\min} = 2 \text{ \AA}$.

$$\text{Ответ: } \lambda = \sqrt{\frac{\pi\hbar\lambda_{\min}}{mc}} \approx 1,6 \cdot 10^{-11} \text{ м} = 0,16 \text{ \AA}.$$

Задача 3.4.5 (3.12 [1]). В электронном микроскопе кинетическая энергия пучка электронов равна $T \approx 100 \text{ кэВ}$. Возможно ли с помощью такого микроскопа «увидеть» отдельные атомы и атомные ядра?

$$\text{Ответ: } \lambda = \frac{hc}{\sqrt{T^2 + 2Tmc^2}} \approx 3,9 \cdot 10^{-12} \text{ м}, \quad R_{\text{атом}} \gg \lambda \gg R_{\text{ядро}}.$$

Атомы «увидеть» можно, ядра – нет.

Задача 3.4.6. Исходя из выражения для волны де Бройля свободной релятивистской частицы, найти фазовую и групповую скорость безмассовой частицы.

$$\text{Ответ: } v_{\text{фаз}} = v_{\text{гр}} = c.$$

Задача 3.4.7. Потенциальная энергия частицы массой m имеет вид одномерной ямы с бесконечно высокими стенками ($U(x) = 0$, если $0 < x < L$; иначе $U(x) = \infty$). Найти возможные значения энергии частицы, если возможны только такие состояния частицы, когда узлы волны де Бройля совпадают с границами ямы ($x = 0$ и $x = L$).

$$\text{Ответ: } E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Задача 3.4.8 (3.20 [1]). Используя соотношение неопределенностей Гейзенберга, оценить минимально возможное

значение кинетической энергии частицы в двумерной бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме размером $a \times b$. Сделать численную оценку для энергии электрона, при условии $a = b = 1 \text{ \AA}$. Сравнить полученную оценку с точным результатом, следующим из задачи 3.4.7.

$$\text{Ответ: } T \approx \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{a^2} + \frac{1}{b^2} \right) \approx 8 \text{ эВ},$$

$$E_{\text{осн}} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{a^2} + \frac{1}{b^2} \right) \approx 75 \text{ эВ}.$$

Задача 3.4.9. Используя соотношение неопределенностей, оценить кинетическую энергию α -частицы в атомном ядре (радиус ядра $R \approx 10^{-15} \text{ м}$).

$$\text{Ответ: } T \approx \frac{\hbar^2}{2m_\alpha R^2} \approx 5 \text{ МэВ}.$$

Задача 3.4.10 (3.29 [1]). Используя соотношение неопределенностей, оценить минимально возможный радиус R_{\min} прямоугольной сферически симметричной потенциальной ямы глубины U_0 , в которой может удержаться частица массой m .

$$\text{Ответ: } R_{\min} \approx \frac{\hbar}{\sqrt{2mU_0}}.$$

Задача 3.4.11. Свободная нерелятивистская частица массой m , движущаяся равномерно и прямолинейно со скоростью v_0 , описывается волновым пакетом шириной Δx_0 . Частица пролетает расстояние L . Используя соотношение неопределенностей, найти условие, при котором уширением волнового пакета можно пренебречь.

$$\text{Ответ: } \Delta x_0 \gg \sqrt{\frac{\hbar L}{mv_0}}.$$

Задача 3.4.12. Параллельный пучок электронов движется со скоростью v_0 и падает на экран с двумя узкими щелями, находящимися на расстоянии d друг от друга. На втором экране,

находящемся на расстоянии L от первого, наблюдается интерференционная картина (схема Юнга). Используя гипотезу де Бройля, найти расстояние a между соседними интерференционными максимумами ($d, a \ll L$).

Ответ:
$$a = \frac{L}{d} \frac{2\pi\hbar}{mv_0}.$$

Список литературы

1. Сборник задач по атомной физике / Под ред. С.С. Красильникова, А.М. Попова, О.В. Тихоновой. – М.: Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, 2010. – 217 с.
2. Миронова Г.А., Брандт Н.Н., Салецкий А.М., Поляков О.П., Трубачев О.О. Введение в квантовую физику в вопросах и задачах. – М.: Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, 2012. – 320 с.

ГЛАВА 4 ПРОСТЕЙШИЕ МОДЕЛИ АТОМА ВОДОРОДА

4.1. Теоретический материал

1. Модель атома Томсона. Согласно этой модели, электроны находятся в шаровой области, заполненной положительно заряженным веществом, с зарядом, равным по величине суммарному заряду электронов. Атом водорода представляет собой равномерно заряженный шар радиусом $R \approx 10^{-10}$ м, в центре которого находится электрон. При отклонении электрона от положения равновесия на него будет действовать возвращающая сила. В результате электрон будет совершать колебания и, двигаясь ускоренно, излучать. Таким образом, без учета затухания, атом водорода в модели Томсона имеет дискретный спектр, состоящий всего лишь из одной линии.

2. Дифференциальное сечение рассеяния. Пусть частица массы m вдали от ядра движется со скоростью v_0 (см. рис. 4.1).

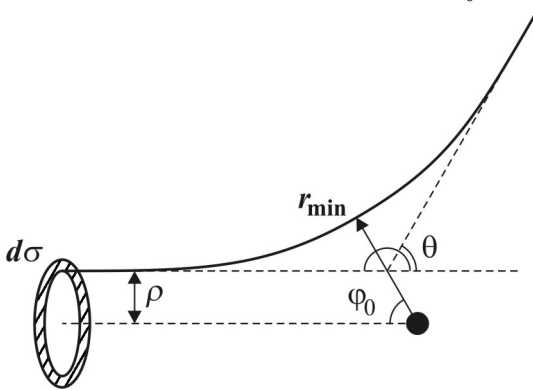


Рис. 4.1. Рассеяние α -частицы на ядре. Здесь ρ – прицельный параметр, θ – угол рассеяния, r_{\min} – минимальное расстояние между α -частицей и ядром, $d\sigma$ – дифференциальное сечение рассеяния.

Если бы частица не взаимодействовала с ядром, то она пролетела бы на расстоянии ρ от ядра. Расстояние ρ называется *прицельным параметром* частицы. Если частица взаимодействует с ядром, то она отклонится на угол θ , называемый *углом рассеяния*. При этом если взаимодействие частицы с ядром центрально

симметрично, т.е. потенциальная энергия частицы зависит только от расстояния до ядра:

$$U(\mathbf{r}) = U(r),$$

то все частицы, попавшие в колечко площадью

$$d\sigma = 2\pi\rho d\rho = 2\pi\rho \left| \frac{\partial\rho}{\partial\theta} \right| d\theta,$$

рассеиваются в один и тот же интервал углов $(\theta, \theta + d\theta)$. Поскольку при рассеянии на ядре прицельный параметр ρ является случайной величиной, принимающей значения от 0 до ∞ , то площадь $d\sigma$ прямо пропорциональна вероятности рассеяния в интервал углов $(\theta, \theta + d\theta)$, которому соответствует телесный угол $d\Omega = 2\pi \sin\theta d\theta$. Формулу для дифференциального сечения рассеяния обычно записывают в виде:

$$d\sigma = \frac{\rho}{\sin\theta} \left| \frac{\partial\rho}{\partial\theta} \right| d\Omega.$$

Если частица взаимодействует с ядром согласно закону Кулона, т.е. её потенциальная энергия равна $U(r) = \alpha/r$, то для дифференциального сечения рассеяния имеем *формулу Резерфорда*:

$$d\sigma = \left(\frac{\alpha}{2mv_0^2} \right)^2 \frac{d\Omega}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}.$$

Отклонения от формулы Резерфорда должны наблюдаться в том случае, если частица попадает непосредственно в ядро, поскольку внутри ядра на частицу дополнительно действуют силы неэлектромагнитного происхождения.

3. Модель атома Резерфорда. В 1909 году Гейгер и Марсден исследовали рассеяние α -частиц при их прохождении через тонкую (~ 1 мкм) золотую фольгу и обнаружили, что отклонения от формулы Резерфорда соответствуют размеру ядра $R_{\text{я}} \approx 10^{-15}$ м, т.е. атомное ядро должно быть на пять порядков меньше, чем атом.

Для объяснения экспериментов Гейгера и Марсдена Резерфорд предложил планетарную модель атома. Согласно этой модели, атом состоит из положительно заряженного ядра, вокруг которого вращаются электроны. Однако модель Резерфорда приводила к радиационной неустойчивости атома. Согласно законам классической электродинамики, движущийся с ускорением электрон

должен терять энергию за счет излучения и неминуемо падать на ядро. Это противоречило экспериментально наблюдаемой устойчивости атомов.

4. Модель атома Бора. В 1913 году для объяснения известных закономерностей линейчатого спектра атома водорода Бор модернизировал модель атома Резерфорда, дополнив ее положениями, известными теперь как *постулаты Бора*:

- 1) Атом может находиться только в *стационарных состояниях*, которые характеризуются дискретными уровнями энергии $E_1, E_2, \dots, E_n, \dots$. В этих состояниях атом не излучает и не поглощает энергию.
- 2) При переходе атома из одного стационарного состояния в другое он излучает или поглощает квант света (фотон) с энергией $\hbar\omega_{if} = |E_f - E_i|$.

Орбиты, которые соответствуют стационарным состояниям, определяются *правилом квантования Бора*, согласно которому момент импульса L электрона должен быть кратен постоянной Планка:

$$L = n\hbar, \quad \text{где } n = 1, 2, 3, \dots$$

Из модели Бора непосредственно следовала полученная ранее экспериментально *обобщенная формула Бальмера*, позволяющая рассчитать длины волн линий в спектре атома водорода и водородоподобных ионов:

$$\frac{1}{\lambda} = Z^2 R_\infty \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right),$$

где n и $m > n$ – натуральные числа, Z – зарядовое число ядра, $R_\infty = 1,0974 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1}$ – постоянная Ридберга.

5. Правило квантования Бора–Зоммерфельда. Правило квантования Бора можно записать в более общем виде, пригодном для решения более широкого спектра задач:

$$\oint p dq = 2\pi\hbar n,$$

где $n = 1, 2, 3, \dots$, а q и p – обобщенные координата и сопряженный ей импульс частицы. Интеграл берется по полному периоду классического движения частицы.

Напомним, что если кинетическую и потенциальную энергию системы можно представить в виде функции от координат q и

скоростей \dot{q} , т.е. $T = T(q, \dot{q})$ и $U = U(q, \dot{q})$, то импульс p , сопряженный координате q , вычисляется по формуле:

$$p = \frac{\partial(T - U)}{\partial \dot{q}}.$$

6. Важные замечания. Во-первых, во всех рассмотренных задачах мы будем использовать обозначение:

$$e^2 = \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0},$$

где $q_e = -1,6 \cdot 10^{-19}$ Кл – заряд электрона.

Во-вторых, все рассмотренные здесь модели атома обладают теми или иными недостатками. Тем не менее, каждая из них внесла свой вклад в становление квантовой физики.

4.2. Задачи с решениями

Задача 4.2.1. Согласно модели Томсона атом водорода представляет собой однородно заряженный шар радиусом $R = 10^{-10}$ м с общим зарядом $q = |q_e| = 1,6 \cdot 10^{-19}$ Кл, в центре которого находится один электрон. Найти частоту ω_0 и длину волны λ_0 излучения такого атома.

Решение

Вначале найдем напряженность электрического поля E внутри однородно заряженного шара. Для этого воспользуемся теоремой Гаусса:

$$\oint_{\Sigma} \mathbf{E} ds = \frac{Q}{\epsilon_0}, \quad (4.1)$$

где Σ – сферическая поверхность радиусом $r < R$, центр которой совпадает с центром атома, $Q = q \frac{r^3}{R^3}$ – электрический заряд внутри этой сферической поверхности. В силу сферической симметрии задачи, электрическое поле $\mathbf{E}(r)$ направлено нормально к поверхности Σ , и его модуль $E(r)$ во всех точках на поверхности Σ одинаков. Поэтому из (4.1) получим:

$$4\pi r^2 E(r) = \frac{q}{\epsilon_0} \frac{r^3}{R^3},$$

откуда

$$\mathbf{E}(r) = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \frac{\mathbf{r}}{R^3}.$$

На электрон, находящийся внутри зараженного шара, действует сила $\mathbf{F}(r) = -|q_e|\mathbf{E}(r)$, направленная к центру сферы. Поэтому уравнение движения электрона имеет вид:

$$\ddot{\mathbf{r}} + \left(\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{mR^3} \right) \mathbf{r} = 0.$$

Это уравнение трехмерного гармонического осциллятора, колеблющегося с частотой

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{mR^3}} = \frac{e}{\sqrt{mR^3}} \approx 1,6 \cdot 10^{16} \text{ с}^{-1}.$$

Электрон излучает электромагнитные волны той же частоты ω_0 . Длина волны электромагнитного излучения равна

$$\lambda_0 = \frac{2\pi c}{\omega_0} \approx 1,2 \cdot 10^{-7} \text{ м} = 1200 \text{ \AA}.$$

Замечание. Полученное значение λ_0 близко к длине волны головной линии серии Лаймана (1216 \AA). Движущийся с ускорением электрон должен терять энергию за счет излучения и, совершая затухающие колебания, возвращаться за время порядка 10^{-10} с в исходное положение равновесия. Таким образом, атом Томсона устойчив в отличие от, например, атома Резерфорда. Однако недостаток модели Томсона очевиден: атом излучает только на одной частоте.

$$\text{Ответ: } \omega_0 = \frac{e}{\sqrt{mR^3}} \approx 1,6 \cdot 10^{16} \text{ с}^{-1}, \lambda_0 = \frac{2\pi c}{\omega_0} \approx 1200 \text{ \AA}.$$

Задача 4.2.2. Считая атом водорода гармоническим осциллятором с частотой ω_0 (модель Томсона), определить частоты ω излучения атома во внешнем однородном стационарном магнитном поле \mathbf{B} . Считать, что магнитное поле слабое ($|q_e|B \ll m\omega_0$).

Решение

В магнитном поле на электрон действует сила Лоренца:

$$\mathbf{F} = -q[\mathbf{v} \times \mathbf{B}].$$

Так же как и в задаче 4.2.1, здесь мы используем обозначение $q = |q_e|$. Уравнение движения электрона в атоме водорода Томсона принимает вид:

$$\ddot{\mathbf{r}} + \frac{q}{m}[\dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{B}] + \omega_0^2 \mathbf{r} = 0, \quad (4.2)$$

где ω_0 – частота излучения атома в отсутствие магнитного поля (см. задачу 4.2.1). Направим ось z декартовой системы координат вдоль направления вектора \mathbf{B} . Тогда уравнение движения электрона (4.2) в проекциях на оси координат будет иметь вид

$$\ddot{x} + \frac{qB}{m} \dot{y} + \omega_0^2 x = 0, \quad (4.3)$$

$$\ddot{y} - \frac{qB}{m} \dot{x} + \omega_0^2 y = 0, \quad (4.4)$$

$$\ddot{z} + \omega_0^2 z = 0. \quad (4.5)$$

Уравнение (4.5) – это уравнение гармонического осциллятора, колеблющегося вдоль направления магнитного поля с частотой ω_0 . В том, что частота его колебаний не изменяется во внешнем поле \mathbf{B} , нет ничего удивительного. Действительно, магнитное поле не оказывает никакого влияния на частицу, скорость \mathbf{v} которой параллельна индукции магнитного поля \mathbf{B} .

Решение системы дифференциальных уравнений (4.3) и (4.4) будем искать в виде

$$x(t) = x_0 e^{i\omega t} \quad \text{и} \quad y(t) = y_0 e^{i\omega t}. \quad (4.6)$$

Подставляя (4.6) в уравнения (4.3) и (4.4), получим однородную систему линейных уравнений:

$$\left(\omega_0^2 - \omega^2\right)x_0 + i\frac{qB\omega}{m}y_0 = 0, \quad (4.7)$$

$$-i\frac{qB\omega}{m}x_0 + \left(\omega_0^2 - \omega^2\right)y_0 = 0. \quad (4.8)$$

Тривиальное решение $x_0 = y_0 = 0$ системы уравнений (4.7) и (4.8) нас не интересует, поскольку оно соответствует отсутствию колебаний вдоль осей x и y . Чтобы система имела нетривиальное

решение, необходимо, чтобы уравнения были линейно зависимы, т.е.

$$\det \begin{vmatrix} (\omega_0^2 - \omega^2) & i \frac{qB\omega}{m} \\ -i \frac{qB\omega}{m} & (\omega_0^2 - \omega^2) \end{vmatrix} = 0.$$

Раскрывая определитель, получим:

$$(\omega_0^2 - \omega^2)^2 = \left(\frac{qB}{m}\right)^2 \omega^2. \quad (4.9)$$

Это квадратное уравнение относительно ω^2 , и его легко решить точно. Однако в приближении слабого магнитного поля $|q_e|B \ll m\omega_0$ можно поступить следующим образом. Частота ω будет отличаться от ω_0 на малую величину $\Delta\omega = \omega - \omega_0$ ($|\Delta\omega| \ll \omega_0$), поэтому уравнение (4.9) можно приближенно записать в виде:

$$4\omega_0^2 (\Delta\omega)^2 \approx \left(\frac{qB}{m}\right)^2 \omega_0^2,$$

откуда

$$\Delta\omega \approx \pm \frac{qB}{2m} = \pm\Omega.$$

Здесь $\Omega = qB/2m$ – частота ларморовой прецессии. Таким образом, электрон в атоме Томсона может колебаться и излучать на трех частотах: $\omega_0 - \Omega$, ω_0 и $\omega_0 + \Omega$. Эти три частоты излучения образуют нормальный триплет Лоренца.

Замечание. Эффект расщепления частоты излучения на нормальный триплет Лоренца в слабом магнитном поле называется *нормальным эффектом Зеемана*. Отметим, что для ряда атомов эффект Зеемана оказывается *аномальным*, т.е. частоты излучения расщепляются более чем на три частоты. В рамках теории атома Томсона аномальный эффект Зеемана объяснить нельзя.

Ответ: $\omega = \omega_0, \omega_0 \pm \Omega$, где $\Omega = \frac{|q_e|B}{2m}$.

Задача 4.2.3. Найдите минимальное расстояние r_{\min} , на которое может приблизиться α -частица ${}^4_2\text{He}^{++}$ с кинетической энергией $T_\alpha = 6$ МэВ к ядру золота ${}^{197}_{79}\text{Au}$ при лобовом столкновении.

Решение

Поскольку система « α -частица–ядро» замкнута, то в процессе рассеяния энергия и импульс системы будут сохраняться. Будем считать, что в начальном состоянии ядро покоится $\mathbf{p}_{\text{Au}} = 0$. При лобовом столкновении в момент максимального сближения α -частица и ядро движутся с одинаковой скоростью, поэтому систему α -частица – ядро можно рассматривать как частицу массы $(m_\alpha + M_{\text{Au}})$. Тогда законы сохранения энергии и импульса будут иметь вид:

$$T_\alpha = T_{\alpha+\text{Au}} + \frac{Z_\alpha Z_{\text{Au}} e^2}{r_{\min}} \quad \text{и} \quad \mathbf{p}_\alpha = \mathbf{p}_{\alpha+\text{Au}},$$

где $Z_\alpha = 2$, $Z_{\text{Au}} = 79$. Поскольку $T_\alpha \ll m_\alpha c^2$, то кинетическая энергия и импульс связаны нерелятивистскими соотношениями:

$$T_\alpha = \frac{p_\alpha^2}{2m_\alpha} \quad \text{и} \quad T_{\alpha+\text{Au}} = \frac{p_{\alpha+\text{Au}}^2}{2(m_\alpha + M_{\text{Au}})} = \frac{T_\alpha m_\alpha}{m_\alpha + M_{\text{Au}}}.$$

При написании последнего равенства мы воспользовались законом сохранения импульса. Выражая r_{\min} из закона сохранения энергии, получим:

$$r_{\min} = \frac{Z_\alpha Z_{\text{Au}} e^2}{T_\alpha} \left(1 + \frac{m_\alpha}{M_{\text{Au}}} \right) \approx \frac{Z_\alpha Z_{\text{Au}} e^2}{T_\alpha} = 3,8 \cdot 10^{-14} \text{ м}.$$

Слагаемым $m_\alpha/M_{\text{Au}} \approx 0,02$ можно пренебречь по сравнению с единицей.

$$\text{Ответ: } r_{\min} \approx \frac{Z_\alpha Z_{\text{Au}} e^2}{T_\alpha} = 3,8 \cdot 10^{-14} \text{ м}.$$

Задача 4.2.4. Рассмотрим рассеяние α -частицы на тяжелом ядре $M_\gamma \gg m_\alpha$ с зарядом $Z_\gamma |q_e|$ в случае, когда прицельный параметр α -частицы – ρ (см. рис. 4.1), начальная скорость $v_0 \ll c$.

На какое минимальное расстояние r_{\min} α -частица приблизится к ядру?

Решение

Будем считать, что в начальный момент α -частица бесконечно удалена от ядра. Её кинетическая энергия и момент импульса относительно ядра равны

$$T_0 = \frac{m_\alpha v_0^2}{2} \quad \text{и} \quad L_0 = m_\alpha v_0 \rho.$$

Потенциальная энергия взаимодействия α -частицы с ядром сферически симметрична:

$$U(r) = \frac{Z_\alpha Z_\text{я} e^2}{r} \equiv \frac{\alpha}{r},$$

поэтому траектория частицы будет лежать в плоскости, проходящей через ядро. Введем систему координат, начало координат которой совпадает с положением ядра, а траектория α -частицы лежит в плоскости ХОУ. Тогда кинетическая энергия α -частицы и её момент импульса будут равны

$$T = \frac{m_\alpha v^2}{2} = \frac{m_\alpha}{2} (\dot{x}^2 + \dot{y}^2) \quad \text{и} \quad L = [\mathbf{r} \times \mathbf{p}]_z = m_\alpha (x\dot{y} - y\dot{x}). \quad (4.10)$$

Эти выражения удобнее записать в полярной системе координат:

$$x = r \cos \varphi \quad \text{и} \quad y = r \sin \varphi. \quad (4.11)$$

Дифференцируя (4.11) по времени:

$$\dot{x} = \dot{r} \cos \varphi - r \dot{\varphi} \sin \varphi,$$

$$\dot{y} = \dot{r} \sin \varphi + r \dot{\varphi} \cos \varphi$$

и подставляя в выражения (4.10) для кинетической энергии и момента импульса, получим:

$$T = \frac{m_\alpha}{2} (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\varphi}^2) \quad \text{и} \quad L = m_\alpha r^2 \dot{\varphi}. \quad (4.12)$$

Покажем что, если частица находится в центральном поле, т.е. $U(\mathbf{r}) = U(r)$, то момент импульса частицы сохраняется. Действительно,

$$\frac{dL_z}{dt} = [\mathbf{r} \times \mathbf{F}]_z = xF_y - yF_x = - \left(x \frac{\partial U}{\partial y} - y \frac{\partial U}{\partial x} \right) = - \frac{\partial U}{\partial r} \left(x \frac{y}{r} - y \frac{x}{r} \right) = 0,$$

откуда следует, что $L_z = \text{const}$.

Очевидно, что кулоновское поле центрально, поэтому из закона сохранения момента импульса $L = L_0$ найдем:

$$\dot{\phi} = \frac{v_0 \rho}{r^2}. \quad (4.13)$$

Подставляя (4.13) в закон сохранения энергии

$$\frac{m_\alpha v_0^2}{2} = \frac{m_\alpha}{2} (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\phi}^2) + \frac{\alpha}{r},$$

найдем

$$\dot{r} = \sqrt{v_0^2 - \frac{2\alpha}{m_\alpha r} - \frac{v_0^2 \rho^2}{r^2}}. \quad (4.14)$$

При $r = r_{\min}$ производная \dot{r} обращается в нуль. Таким образом, приравняв выражение под корнем (4.14) к нулю, мы получим квадратное уравнение:

$$r_{\min}^2 - \frac{2\alpha}{m_\alpha v_0^2} r_{\min} - \rho^2 = 0, \quad (4.15)$$

откуда

$$r_{\min} = \frac{\alpha}{m_\alpha v_0^2} + \sqrt{\left(\frac{\alpha}{m_\alpha v_0^2}\right)^2 + \rho^2}. \quad (4.16)$$

Второй корень уравнения (4.15) отрицателен и не имеет физического смысла.

Замечание. Если прицельный параметр ρ равен нулю, то

$$r_{\min} = \frac{2\alpha}{m_\alpha v_0^2} = \frac{Z_\alpha Z_\gamma e^2}{T_0},$$

т.е. мы приходим к результату задачи 4.2.3.

Ответ:
$$r_{\min} = \frac{Z_\alpha Z_\gamma e^2}{m_\alpha v_0^2} + \sqrt{\left(\frac{Z_\alpha Z_\gamma e^2}{m_\alpha v_0^2}\right)^2 + \rho^2}.$$

Задача 4.2.5. Рассмотрим рассеяние α -частицы на тяжелом ядре $M_\gamma \gg m_\alpha$, заряд которого равен $Z_\gamma |q_e|$. Прицельный параметр

α -частицы ρ , начальная скорость $v_0 \ll c$. Найти угол θ рассеяния α -частицы. Получить формулу Резерфорда для дифференциального сечения рассеяния.

Решение

В задаче 4.2.4 были получены следующие дифференциальные уравнения, описывающие движение α -частицы:

$$\frac{d\varphi}{dt} = \frac{v_0 \rho}{r^2} \quad (4.17)$$

и

$$\frac{dr}{dt} = \sqrt{v_0^2 - \frac{2\alpha}{m_\alpha r} - \frac{v_0^2 \rho^2}{r^2}}, \quad (4.18)$$

где $\alpha = Z_\alpha Z_\gamma e^2$. Исключая dt из уравнений (4.17) и (4.18), найдем

$$d\varphi = \frac{\frac{v_0 \rho}{r^2} dr}{\sqrt{v_0^2 - \frac{2\alpha}{m_\alpha r} - \frac{v_0^2 \rho^2}{r^2}}}. \quad (4.19)$$

Интегрируя (4.19) по φ от $\pi - \varphi_0$ до π и по r от r_{\min} до ∞ , получим:

$$\varphi_0 = \int_{r_{\min}}^{\infty} \frac{\frac{v_0 \rho}{r^2} dr}{\sqrt{v_0^2 - \frac{2\alpha}{m_\alpha r} - \frac{v_0^2 \rho^2}{r^2}}}. \quad (4.20)$$

Угол φ_0 показан на рис. 4.1. Для вычисления интеграла в (4.20) сделаем замену переменных $x = 1/r$. Тогда

$$\varphi_0 = \int_0^{1/r_{\min}} \frac{dx}{\sqrt{\frac{1}{\rho^2} - \frac{2\alpha}{m_\alpha v_0^2 \rho^2} x - x^2}} = \int_0^{1/r_{\min}} \frac{dx}{\sqrt{\left(\frac{1}{\rho^2} + A^2\right) - (x + A)^2}},$$

где $A = \alpha / m v_0^2 \rho^2$. Мы получили известный табличный интеграл:

$$\varphi_0 = -\arccos \left(\frac{x + A}{\sqrt{1/\rho^2 + A^2}} \right) \Bigg|_0^{1/r_{\min}}.$$

Используя выражение (4.16), найденное в задаче 4.2.4, легко убедиться в том, что подстановка верхнего предела дает нуль. В результате получим:

$$\varphi_0 = \arccos\left(\frac{B}{\sqrt{1+B^2}}\right), \quad \text{где} \quad B = \frac{Z_\alpha Z_\beta e^2}{mv_0^2 \rho}. \quad (4.21)$$

Пользуясь формулами элементарной тригонометрии и соотношением (4.21), легко получить

$$\operatorname{tg}^2 \varphi_0 = \frac{1}{\cos^2 \varphi_0} - 1 = \frac{1}{B^2}. \quad (4.22)$$

Как видно из рис. 4.1, угол φ_0 связан с углом рассеяния θ соотношением:

$$\varphi_0 = \frac{\pi - \theta}{2}, \quad (4.23)$$

поэтому

$$\operatorname{tg}^2 \varphi_0 = \operatorname{tg}^2\left(\frac{\pi - \theta}{2}\right) = \operatorname{ctg}^2 \frac{\theta}{2}. \quad (4.24)$$

Из (4.21), (4.22) и (4.24) получим:

$$\theta = 2 \operatorname{arctg} B = 2 \operatorname{arctg}\left(\frac{Z_\alpha Z_\beta e^2}{mv_0^2 \rho}\right). \quad (4.25)$$

При малых углах рассеяния $\theta \ll 1$ справедлива приближенная формула:

$$\theta \approx 2 \frac{Z_\alpha Z_\beta e^2}{mv_0^2 \rho} = \frac{Z_\alpha Z_\beta e^2}{T_0 \rho}.$$

Для нахождения дифференциального сечения рассеяния выразим из (4.25) прицельный параметр α -частицы:

$$\rho(\theta) = \frac{Z_\alpha Z_\beta e^2}{mv_0^2} \operatorname{ctg} \frac{\theta}{2}. \quad (4.26)$$

Подставляя (4.26) в выражение для дифференциального сечения рассеяния

$$d\sigma = \frac{\rho(\theta)}{\sin \theta} \left| \frac{d\rho(\theta)}{d\theta} \right| d\Omega,$$

получим формулу Резерфорда:

$$d\sigma = \left(\frac{Z_\alpha Z_\beta e^2}{2mv_0^2} \right)^2 \frac{d\Omega}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}. \quad (4.27)$$

Замечание. Формула Резерфорда (4.27) примечательна тем, что она справедлива и в рамках нерелятивистской квантовой теории.

$$\text{Ответ: } \theta = 2 \arctg \left(\frac{Z_\alpha Z_\beta e^2}{mv_0^2 \rho} \right), \quad d\sigma = \left(\frac{Z_\alpha Z_\beta e^2}{2mv_0^2} \right)^2 \frac{d\Omega}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}.$$

Задача 4.2.6. В рамках модели Бора рассмотреть водородоподобный ион, заряд ядра которого $Z|q_e|$. Найти радиусы r_n круговых орбит, скорости v_n , энергии E_n и круговые частоты ω_n электронов на этих орбитах. Массу ядра считать бесконечно большой.

Решение

Согласно модели Бора электрон в атоме движется по круговой орбите радиуса r с постоянной скоростью v . Считая, что масса ядра много больше массы электрона ($M_\alpha \gg m$) и скорость электрона мала по сравнению со скоростью света ($v \ll c$), запишем уравнение движения электрона в проекции на радиальное направление:

$$ma_n = m \frac{v^2}{r} = \frac{Ze^2}{r^2},$$

откуда, в частности, следует, что

$$mv^2 = \frac{Ze^2}{r}, \quad (4.28)$$

т.е. $2T = -U$, где T и U – кинетическая и потенциальная энергии электрона, соответственно.

Однако одного уравнения движения не достаточно для однозначного определения радиуса орбиты электрона, поэтому на движение электрона дополнительное условие, правило квантования Бора

$$L = mvr = n\hbar, \quad (4.29)$$

где $n = 1, 2, 3, \dots$ – натуральное число.

Исключая из уравнений (4.28) и (4.29) скорость, получаем выражение для радиусов орбит:

$$r_n = \frac{\hbar^2}{me^2} \frac{n^2}{Z} = a_0 \frac{n^2}{Z}, \quad (4.30)$$

где $a_0 \equiv r_1^{\text{H}} = \frac{\hbar^2}{me^2} = 5,3 \cdot 10^{-11}$ м – радиус первой боровской орбиты атома водорода.

Скорость электрона на боровской орбите можно теперь найти из правила квантования Бора (4.29) и выражения (4.30):

$$v_n = \frac{n\hbar}{mr_n} = \frac{e^2 Z}{\hbar n} = \alpha c \frac{Z}{n}, \quad (4.31)$$

где $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}$ – постоянная тонкой структуры. Максимальную скорость электрон имеет на первой боровской орбите. Для атома водорода она составляет $v_1^{\text{H}} = c/137$. Это оправдывает использование нами нерелятивистского приближения $v \ll c$. Однако для более тяжелых водородоподобных ионов нерелятивистское приближение перестает быть справедливым.

Используя соотношения (4.28) и (4.30), найдем механическую энергию электрона на боровских орбитах:

$$E_n = T_n + U_n = \frac{U_n}{2} = -\frac{Ze^2}{2r_n} = -\frac{Z^2 e^4 m}{2\hbar^2 n^2} = -\text{Ry} \frac{Z^2}{n^2}, \quad (4.32)$$

где $\text{Ry} = \frac{me^4}{2\hbar^2} \approx 13,6$ эВ – единица измерения энергии, называемая Ридбергом. Энергия основного состояния атома водорода равна $E_1^{\text{H}} = -\text{Ry}$, т.е. энергия ионизации атома водорода равна 1 Ry.

Используя формулы (4.30) и (4.31), вычислим круговые частоты электронов на боровских орбитах

$$\omega_n = \frac{v_n}{r_n} = \frac{me^4 Z^2}{\hbar^3 n^3} = \omega_1^{\text{H}} \frac{Z^2}{n^3}, \quad (4.33)$$

где $\omega_1^{\text{H}} = \frac{me^4}{\hbar^3} \approx 4,13 \cdot 10^{16}$ с⁻¹ – частота вращения электрона на первой боровской орбите атома водорода.

Замечания

1. В модели Бора энергия электрона зависит только от одного числа $n = 1, 2, 3, \dots$, которое называется *главным квантовым числом*. Состояние электрона с $n = 1$ называется *основным состоянием*.

2. При выводе формул (4.30)–(4.33), мы считали массу ядра $M_{\text{я}}$ бесконечно большой, что было оправданно, так как масса протона M_p в 1836 раз больше массы электрона m . Для учета конечности массы ядра, в полученных формулах следует заменить массу электрона m на приведенную массу системы «электрон-ядро»:

$$\mu = \frac{M_{\text{я}} m}{M_{\text{я}} + m}.$$

Ответ: $r_n = \frac{\hbar^2}{m e^2} \frac{n^2}{Z}$, $v_n = \frac{e^2}{\hbar} \frac{Z}{n}$, $E_n = -\frac{m e^4}{2 \hbar^2} \frac{Z^2}{n^2}$, $\omega_n = \frac{m e^4}{\hbar^3} \frac{Z^2}{n^3}$,
где $n = 1, 2, 3, \dots$

Задача 4.2.7. Считая электрон релятивистским, вычислить в рамках теории Бора радиусы r_n круговых орбит электрона, его скорости v_n , энергии E_n водородоподобного иона. Массу ядра считать бесконечно большой.

Решение

Как уже отмечалось в задаче 4.2.6, если зарядовое число Z ядра велико, то соотношение $v \ll c$ перестает быть справедливым для электрона на первой боровской орбите. Поэтому решение задачи 4.2.6 должно быть модифицировано следующим образом. Уравнение движения электрона будет иметь вид:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{m \mathbf{v}}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \right) = \mathbf{F}, \quad (4.34)$$

где \mathbf{F} – сила кулоновского притяжения. При вычислении производной по времени в левой части (4.34) учтем, что квадрат скорости частицы, движущейся равномерно по окружности, не зависит от времени. Поэтому

$$\frac{m}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} \frac{dv}{dt} = \mathbf{F}. \quad (4.35)$$

В проекции на радиальное направление уравнение движения электрона (4.35) принимает вид:

$$\frac{m}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} \frac{v^2}{r} = \frac{Ze^2}{r^2}. \quad (4.36)$$

В релятивистском случае правило квантования Бора (4.29) принимает вид:

$$L = pr = \frac{mvr}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} = n\hbar, \quad \text{где } n = 1, 2, 3, \dots \quad (4.37)$$

В результате, из (4.36) и (4.37) получим систему двух уравнений:

$$mv^2 = \frac{Ze^2}{r} \sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}, \quad (4.38)$$

$$mur = n\hbar \sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}. \quad (4.39)$$

Деля (4.38) на (4.39), получим:

$$v_n = \frac{e^2}{\hbar} \frac{Z}{n} = \alpha c \frac{Z}{n}, \quad (4.40)$$

т.е. точно такое же выражение для скорости электрона, что и в нерелятивистском случае. Из формулы (4.40) мы можем сделать важный вывод. Согласно теории Бора существование водородоподобных ионов с $Z > 137$ невозможно, иначе электроны на первой боровской орбите двигались бы со скоростью, большей скорости света.

Используя выражения (4.39) и (4.40), вычислим радиусы боровских орбит:

$$r_n = \frac{n\hbar}{mv_n} \sqrt{1-\frac{v_n^2}{c^2}} = a_0 \frac{n^2}{Z} \sqrt{1-\left(\frac{\alpha Z}{n}\right)^2} \quad (4.41)$$

и энергии стационарных состояний:

$$E_n = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - \frac{v_n^2}{c^2}}} - \frac{Ze^2}{r_n} - mc^2 = mc^2 \left[\sqrt{1 - \left(\frac{\alpha Z}{n}\right)^2} - 1 \right]. \quad (4.42)$$

Раскладывая $\sqrt{1 - (\alpha Z/n)^2}$ в ряд Тейлора, легко убедиться, что при $\alpha Z/n \ll 1$ (4.41) и (4.42) совпадают с формулами (4.30) и (4.32), полученными в задаче 4.2.6.

Ответ: $r_n = a_0 \frac{n^2}{Z} \sqrt{1 - \left(\frac{\alpha Z}{n}\right)^2}$, $v_n = \alpha c \frac{Z}{n}$,

$$E_n = mc^2 \left[\sqrt{1 - \left(\frac{\alpha Z}{n}\right)^2} - 1 \right], \text{ где } \alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}, \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}.$$

Задача 4.2.8. Согласно классической электродинамике, мощность излучения заряда q , движущегося с ускорением a , равна $P = \frac{2e^2}{3c^3} a^2$. Оцените энергию ΔE , которую в рамках классической электродинамики должен терять электрон, находящийся в основном состоянии атома водорода, за время, равное одному периоду обращения вокруг ядра. Оцените время $\tau_{\text{пад}}$ падения электрона на ядро.

Решение

Ускорение электрона на первой боровской орбите можно выразить из уравнения движения:

$$ma_n = \frac{e^2}{r_1^2},$$

где a_n – нормальное ускорение электрона, $r_1 = 5,3 \cdot 10^{-11}$ м – радиус первой боровской орбиты электрона. Подставляя a_n в классическое выражение для мощности, получим:

$$P = \frac{2e^2}{3c^3} a^2 = \frac{2e^2}{3c^3} \left(\frac{e^2}{mr_1^2} \right)^2 = \frac{2}{3m^2 r_1^4} \left(\frac{e^2}{c} \right)^3 \approx 2,9 \cdot 10^{11} \text{ эВ} \cdot \text{с}^{-1}. \quad (4.43)$$

Период обращения электрона на первой боровской орбите атома водорода равен

$$\tau_1 = \frac{2\pi}{\omega_1} = 1,52 \cdot 10^{-16} \text{ с},$$

частота вращения электрона $\omega_1 = 4,13 \cdot 10^{16} \text{ с}^{-1}$ была вычислена в **задаче 4.2.6**. Таким образом, за один период обращения вокруг ядра электрон должен терять энергию

$$\Delta E = P\tau_1 \approx 4,4 \cdot 10^{-5} \text{ эВ}.$$

Обратим внимание на то, что эта величина намного меньше кинетической энергии электрона $T = -E_1 = 13,6 \text{ эВ}$. Таким образом, радиус окружности, по которой движется электрон, уменьшится на величину, малую по сравнению с r_1 , т.е. движение электрона происходит почти по окружности, и наш расчет мощности излучения P оказывается верным.

Если считать, что формула (4.43) для мощности излучения верна и для меньших радиусов r , можно оценить время падения электрона на ядро. Энергия электрона на круговой орбите радиуса r равна

$$E = \frac{U}{2} = -\frac{e^2}{2r},$$

откуда

$$\frac{dE}{dt} = \frac{e^2}{2r^2} \dot{r}. \quad (4.44)$$

С другой стороны, согласно (4.43),

$$\frac{dE}{dt} = -P = -\frac{2e^6}{3m^2c^3r^4}. \quad (4.45)$$

Из (4.44) и (4.45) получаем уравнение для радиуса орбиты электрона:

$$\dot{r} = -\frac{4e^4}{3m^2c^3} \frac{1}{r^2}.$$

Его решение имеет вид:

$$r^3(t) = r_1^3 - \frac{4e^4}{m^2c^3} t. \quad (4.46)$$

Из (4.46) и условия $r^3(\tau_{\text{пад}}) = 0$ находим время падения электрона на ядро:

$$\tau_{\text{пад}} = \frac{r_1^3 m^2 c^3}{4e^4} \approx 1,57 \cdot 10^{-11} \text{ с.}$$

Таким образом, атом водорода, в котором электрон движется по законам классической электродинамики, оказывается нестабильным. Именно поэтому Бор в своей модели «запретил» электронам, находящимся в стационарных состояниях, излучать электромагнитные волны.

Ответ: $\Delta E \approx 4,4 \cdot 10^{-5}$ эВ, $\tau_{\text{пад}} \approx 1,57 \cdot 10^{-11}$ с.

Задача 4.2.9. Найдите длины волн, соответствующих головной линии и границе спектральных серий Лаймана, Бальмера и Пашена, выразив их в нанометрах.

Решение

Согласно второму постулату Бора, водородоподобный ион при переходе из стационарного состояния с энергией E_i в состояние с энергией $E_f < E_i$ излучает фотон, частота которого равна

$$\omega = \frac{E_i - E_f}{\hbar}. \quad (4.47)$$

Подставляя в (4.47) выражение (4.32) для энергии стационарных состояний, найденное в задаче 4.2.6, получим:

$$\frac{2\pi c}{\lambda} = \omega = \frac{1}{\hbar} \left(-\frac{Z^2}{n_i^2} Ry + \frac{Z^2}{n_f^2} Ry \right) = Z^2 \frac{Ry}{\hbar} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right),$$

откуда следует обобщенная формула Бальмера:

$$\frac{1}{\lambda} = Z^2 R_\infty \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right), \quad (4.48)$$

где n_i и $n_f < n_i$ – натуральные числа,

$R_\infty = \frac{Ry}{2\pi\hbar c} = \frac{me^2}{2\pi\hbar^3 c} = 1,0974 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1}$ – постоянная Ридберга для атома с бесконечно тяжелым ядром.

Числа n_i и $n_f < n_i$ для различных спектральных серий принимают следующие значения:

- серия Лаймана (обозначение Ly): $n_f = 1$, $n_i > 1$ (переходы на 1-й уровень);

- серия Бальмера (обозначение H): $n_f = 2$, $n_i > 2$ (переходы на 2-й уровень);
- серия Пашена (обозначение P): $n_f = 3$, $n_i > 3$ (переходы на 3-й уровень).

Головная линия серии – это линия с минимальной частотой (максимальной длиной волны) ($n_i = n_f + 1$). Из формулы Бальмера (4.48) получим выражение для длины волны головной линии:

$$\lambda_{\max} = \frac{1}{Z^2 R_{\infty}} \frac{n_f^2 (n_f + 1)^2}{2n_f + 1}.$$

Головные линии серий Лаймана, Бальмера и Пашена равны соответственно 121,6 нм, 656,5 нм и 1875,6 нм.

Граница серии соответствует линии с максимальной частотой (минимальной длиной волны) ($n_i = \infty$). Тогда для границы серии справедлива формула:

$$\lambda_{\min} = \frac{n_f^2}{Z^2 R_{\infty}}.$$

Граничные длины волн серий Лаймана, Бальмера и Пашена равны соответственно 91,18 нм, 364,7 нм и 820,6 нм.

Замечания.

1. Нумеровать линии принято буквами греческого алфавита, начиная с головной. Например, для серии Бальмера: головная линия обозначается H_{α} , затем идут H_{β} , H_{γ} и т.д.

2. В ответе для удобства восприятия полученные результаты сведены в таблицу, где также указана принадлежность найденных длин волн к видимому, ультрафиолетовому (УФ) или инфракрасному (ИК) диапазону.

Ответ:

Серия	граница, нм	головная, нм	диапазон
Лаймана	91,18	121,6	УФ
Бальмера	364,7	656,5	УФ, видимый
Пашена	820,6	1875,6	ИК

Задача 4.2.10. Определите постоянные Ридберга для водорода ${}^1_1\text{H}$ и дейтерия ${}^2_1\text{H}$ с учетом их масс. Найдите разность длин волн

$\Delta\lambda$ между головными линиями серии Бальмера для водорода ${}^1_1\text{H}$ и дейтерия ${}^2_1\text{H}$.

Решение

Как уже отмечалось в задаче 4.2.9, выражение

$$R_\infty = \frac{me^2}{2\pi\hbar^3c} = 1,0974 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1}$$

для постоянной Ридберга получено в предположении бесконечно большой массы ядра M_y (по сравнению с массой электрона m). Найдем постоянные Ридберга для водорода R_H и дейтерия R_D с учетом их масс, заменив массу электрона m на приведенную массу системы электрон-ядро (см. замечание к задаче 4.2.6):

$$\mu = \frac{M_y m}{M_y + m}.$$

Считая, что массы протона M_p и нейтрона равны, получим:

$$R_H = R_\infty \frac{\mu_H}{m} = \frac{R_\infty}{1 + \frac{m}{M_p}} = \frac{1,0974 \cdot 10^7}{1 + \frac{1}{1836}} = 1,0968 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1},$$

$$R_D = R_\infty \frac{\mu_D}{m} = \frac{R_\infty}{1 + \frac{m}{2M_p}} = \frac{1,0974 \cdot 10^7}{1 + \frac{1}{2 \cdot 1836}} = 1,0971 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1}.$$

Чтобы найти длины волн головных линий серии Бальмера H_α , воспользуемся обобщенной формулой Бальмера (4.48), в которой постоянную Ридберга R_∞ заменим на R_H или R_D , $n_f = 2$, $n_i = 3$:

$$\frac{1}{\lambda_H} = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2} \right) = R_H \frac{5}{36} \quad \text{и} \quad \frac{1}{\lambda_D} = R_D \frac{5}{36},$$

откуда

$$\Delta\lambda = \lambda_H - \lambda_D = \frac{36}{5} \left(\frac{1}{R_H} - \frac{1}{R_D} \right) \approx 1,8 \cdot 10^{-10} \text{ м}.$$

Замечание. В обычном водороде содержание дейтерия составляет $1/6000$, поэтому интенсивность линий дейтерия крайне мала. В 1932 году Г.К. Юри заметил в спектре обогащенного водорода новые, очень слабые линии. Сдвиг этих линий относительно линий водорода соответствовал проведенному им (и

нами) квантово-механическому расчету для атома дейтерия. Так был открыт дейтерий.

$$\text{Ответ: } R_{\text{H}} = \frac{R_{\infty}}{1 + \frac{m}{M_p}} = 1,0968 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1},$$

$$R_{\text{D}} = \frac{R_{\infty}}{1 + \frac{m}{2M_p}} = 1,0971 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1},$$

$$\Delta\lambda = \frac{36}{5} \left(\frac{1}{R_{\text{H}}} - \frac{1}{R_{\text{D}}} \right) \approx 1,8 \cdot 10^{-10} \text{ м}.$$

Задача 4.2.11. Используя правила квантования Бора–Зоммерфельда, найти уровни энергии:

а) электрона в водородоподобном ионе, считая, что электрон движется по круговым орбитам, а ядро бесконечно тяжелое;

б) частицы массы m в прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками;

в) гармонического осциллятора.

Решение

а) *Водородоподобный ион.* Задачу о квантовании водородоподобного иона проще решать в цилиндрических координатах. Выберем начало координат в точке, где расположено атомное ядро, ось z направим перпендикулярно плоскости орбиты электрона. Тогда, как было показано в задаче 4.2.4, кинетическая и потенциальная энергии электрона равны

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

Найдем импульсы, сопряженные координатам r и ϕ :

$$p_r = \frac{\partial(T-U)}{\partial \dot{r}} = m\dot{r} \quad \text{и} \quad p_{\phi} = \frac{\partial(T-U)}{\partial \dot{\phi}} = mr^2 \dot{\phi} = L.$$

Тогда из правила квантования Бора–Зоммерфельда

$$\oint p_{\phi} d\phi = 2\pi\hbar n_{\phi}, \quad n_{\phi} = 1, 2, 3, \dots$$

мы получим правило квантования Бора, аналогичное (4.29):

$$L = \hbar n_{\phi}, \quad n_{\phi} = 1, 2, 3, \dots$$

Из второго правила квантования Бора–Зоммерфельда

$$\oint p_r dr = 2\pi\hbar n_r, \quad n_r = 1, 2, 3, \dots$$

следует, вообще-то говоря, бессодержательный результат: $0 = 2\pi\hbar n_r$, поскольку для круговой орбиты $p_r = m\dot{r} = 0$. Поэтому, действуя далее как в задаче 4.2.6, мы придем к результату:

$$E_n = -\frac{Z^2 e^4 m}{2\hbar^2 n_\phi^2} = -Ry \frac{Z^2}{n_\phi^2}.$$

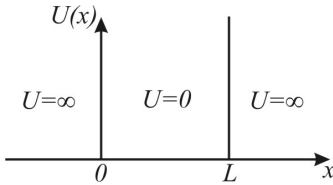


Рис. 4.2. Частица в прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками.

б) Частица в прямоугольной потенциальной яме. Будем считать, что потенциальная энергия нерелятивистской частицы массы m имеет вид (см. рис. 4.2):

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x \in (0, L) \\ \infty, & x \in (-\infty, 0] \cup [L, \infty) \end{cases}.$$

Рассмотрим одномерный случай движения частицы вдоль оси x . Импульсом, сопряженным координате x , является обычный импульс

$$p_x = m\dot{x} = \pm\sqrt{2mE},$$

где $E = T = p_x^2/2m$ – энергия частицы внутри потенциальной ямы. Тогда условие квантования Бора-Зоммерфельда можно записать в виде:

$$\oint p_x dx = 2 \int_0^L \sqrt{2mE} dx = 2L\sqrt{2mE} = 2\pi\hbar n,$$

откуда

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2, \quad \text{где } n = 1, 2, 3, \dots$$

Отметим, что в данном случае метод квантования Бора-Зоммерфельда дает правильные значения для уровней энергии частицы.

в) Гармонический осциллятор. Как и в предыдущем случае, будем рассматривать одномерное движение частицы вдоль оси x . Будем отсчитывать координату x от положения равновесия осциллятора. Тогда координата x и импульс p_x связаны соотношением:

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

где E , m и ω – энергия, масса и частота гармонического осциллятора. Следовательно,

$$p_x = \pm \sqrt{2mE - m^2\omega^2 x^2}.$$

Условие квантования Бора–Зоммерфельда принимает вид

$$\oint p_x dx = 4 \int_0^{x_{\max}} \sqrt{2mE - m^2\omega^2 x^2} dx = 2\pi\hbar n, \quad (4.49)$$

где $x_{\max} = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}$ – максимальное отклонение осциллятора от

положения равновесия. Входящий в (4.49) интеграл легко вычислить, используя замену переменных $x = x_{\max} \sin \alpha$. Действительно

$$\begin{aligned} 4 \int_0^{x_{\max}} \sqrt{2mE - m^2\omega^2 x^2} dx &= 4\sqrt{2mE} x_{\max} \int_0^{\pi/2} \cos^2 \alpha d\alpha = \\ &= 2\sqrt{2mE} x_{\max} \int_0^{\pi/2} (1 + \cos 2\alpha) d\alpha = \pi\sqrt{2mE} \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} = 2\pi \frac{E}{\omega}. \end{aligned}$$

Приравнявая этот интеграл к $2\pi\hbar n$, получим:

$$E_n = n\hbar\omega, \quad \text{где } n = 1, 2, 3, \dots$$

Такое же выражение для энергии гармонического осциллятора использовал Планк при выводе формулы для спектральной плотности равновесного электромагнитного излучения (см. **Главу 1**). Однако правильное значение энергии гармонического осциллятора отличается от найденного на величину $\hbar\omega/2$. Таким образом, в данном случае правило квантования Бора–Зоммерфельда дает неправильный результат.

Замечание. При квантовании водородоподобного иона мы столкнулись с интересной проблемой. Сказав, что электрон движется вокруг ядра по окружности, мы наложили на движение электрона условие связи $r = \text{const}$. В результате пришли к абсурдному результату

$$0 = n_r, \quad \text{где } n_r = 1, 2, 3, \dots$$

Отбросив это абсурдное условие, мы не смогли найти уровни энергии из одних только условий квантования, и пришлось привлекать дополнительные соображения, а именно, уравнение движения электрона по окружности.

Этот пример показывает, что метод квантования Бора–Зоммерфельда не применим к квантованию систем со связями. Аналогичные трудности возникают и при каноническом квантовании систем со связями, например, при квантовании дираковского или электромагнитного поля.

Если не накладывать на движение электрона никаких условий связи, то электрон будет двигаться вокруг ядра по эллипсу, в одном из фокусов которого находится ядро. При этом импульс p_r равен

$$p_r = \sqrt{2mE + \frac{Ze^2}{r} - \frac{L^2}{r^2}},$$

и из условий

$$\oint p_r dr = 2\pi\hbar n_r \quad \text{и} \quad L = \hbar n_\phi$$

Получим:

$$E_{n_\phi, n_r} = -\frac{Z^2 e^4 m}{2\hbar^2 (n_\phi + n_r)^2} = -Ry \frac{Z^2}{(n_\phi + n_r)^2},$$

т.е. теория Бора–Зоммерфельда приводит к таким же уровням энергии, что и теория Бора, но при этом одному и тому же уровню энергии соответствует несколько эллиптических орбит.

Ответ: а) $E_n = -\frac{Z^2 e^4 m}{2\hbar^2 n^2}$, б) $E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2$, в) $E_n = n\hbar\omega$, где $n = 1, 2, 3, \dots$

4.3. Короткие задачи

Задача 4.3.1. Оцените классический радиус электрона r_0 .

Решение

Электростатическая энергия равномерно заряженной сферы радиуса r_0 равна

$$U_{\text{сфера}} = \frac{e^2}{2r_0},$$

а энергия равномерно заряженного шара

$$U_{\text{шар}} = \frac{3e^2}{5r_0}.$$

Поскольку мы не знаем, каким образом заряд может быть распределен внутри электрона (если допустить, что у него вообще есть какая-либо внутренняя структура), то электростатическая энергия электрона по порядку величины должна быть равна

$$U = \frac{e^2}{r_0}.$$

Приравнявая эту величину к массе покоя электрона mc^2 , получим так называемый *классический радиус* электрона

$$r_0 = \frac{e^2}{mc^2} = 2,8 \cdot 10^{-15} \text{ м}.$$

Замечание. Представления об электроне, как о шарике или сфере, не соответствует действительности. Наличие у электрона каких-либо конечных размеров не обнаружено. Установлено лишь экспериментальное ограничение на радиус электрона сверху $r_e < 10^{-23}$ м, что на восемь порядков меньше его классического радиуса.

Ответ: $r_0 = \frac{e^2}{mc^2} = 2,8 \cdot 10^{-15} \text{ м}.$

Задача 4.3.2. В простейшей модели твердого тела с простой кубической решеткой, атомы представляются твердыми шариками радиусом R , каждый из которых занимает объем $V = (2R)^3$ (см. рис. 4.3). Оцените R для алюминия Al и платины Pt, имеющих молярную массу 27 и 195 г/моль и плотность 2,7 и 21,4 г/см³ соответственно.

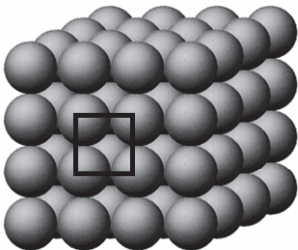


Рис 4.3. Кубическая структура с квадратной упаковкой шаров в слое.

Решение

В одном моле находится N_A атомов,

поэтому $\rho = \frac{M}{VN_A}$ и

$$R = \frac{1}{2} \sqrt[3]{\left(\frac{M}{\rho N_A} \right)}.$$

Подставляя данные задачи, находим:

$$R_{\text{Al}} = 1,3 \text{ \AA} \text{ и } R_{\text{Pt}} = 1,2 \text{ \AA}.$$

Замечание. Несмотря на грубую модель, полученные оценки размера атомов дают правильный порядок величин и показывают, что размер легких и тяжелых атомов практически одинаков.

На самом деле, алюминий и платина имеют границиентрированную кубическую решетку, поэтому на один атом приходится объем $V = (2R)^3 / \sqrt{2}$, поэтому полученные в задаче радиусы нужно умножить на $\sqrt[6]{2} \approx 1,122$.

$$\text{Ответ: } R = \frac{1}{2} \sqrt[3]{\left(\frac{M}{\rho N_A}\right)}, R_{\text{Al}} = 1,3 \text{ \AA}, R_{\text{Pt}} = 1,2 \text{ \AA}.$$

Задача 4.3.3. Следует ли учитывать волновые свойства α -частиц при Резерфордовском рассеянии?

Решение

Для ответа на этот вопрос сравним минимальное расстояние $r_{\min} \approx 3,8 \cdot 10^{-14}$ м, на которое подходит альфа-частица с кинетической энергией $T_\alpha = 6$ МэВ при рассеянии на ядрах золота (задача 4.2.3), с ее длиной волны де Бройля:

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p_\alpha} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_\alpha T_\alpha}} = \frac{6,63 \cdot 10^{-34}}{\sqrt{2 \cdot 4 \cdot 1,67 \cdot 10^{-27} \cdot 6 \cdot 10^6 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}}} = 5,9 \cdot 10^{-15} \text{ м}.$$

Поскольку $\lambda \ll r_{\min}$, волновые свойства α -частиц при Резерфордовском рассеянии можно не учитывать.

Замечание. Как уже отмечалось в задаче 4.2.5, учёт волновых свойств частицы в нерелятивистском приближении приведет к той же самой формуле Резерфорда для дифференциального сечения рассеяния.

Ответ: Волновые свойства α -частиц при Резерфордовском рассеянии можно не учитывать.

Задача 4.3.4. Покажите, что в модели атома Бора на стационарных орбитах укладывается целое число длин волн де Бройля электрона.

Решение

Из правила квантования Бора и выражения для длины волны де Бройля $\lambda = 2\pi\hbar/p$ следует:

$$L = pr = \frac{2\pi\hbar}{\lambda}r = n\hbar, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Откуда получаем:

$$2\pi r = n\lambda,$$

т.е. на длине окружности радиуса r должно укладываться целое число длин волн де Бройля электрона.

Замечание. Полученное условие означает образование на орбите стоячей волны.

Задача 4.3.5. Для основного состояния атома гелия энергия связи электрона равна $E_0 = 24,6$ эВ. Найдите энергию E , необходимую для последовательного удаления обоих электронов из этого атома.

Решение

Энергия связи электрона равна энергии ионизации, т.е. минимальной энергии, необходимой для удаления одного электрона из атома. Таким образом, затратив энергию E_0 , мы получим водородоподобный ион ${}^4_2\text{He}^+$. Его энергия ионизации равна взятой по модулю энергии основного состояния иона

$$|E_1| = Z^2 R_y = 4 \cdot 13,6 = 54,4 \text{ эВ}.$$

Суммарная энергия, необходимая для удаления обоих электронов из атома гелия, равна

$$E = E_0 + |E_1| = E_0 + Z^2 R_y = 24,6 + 54,4 = 79 \text{ эВ}.$$

Ответ: $E = E_0 + Z^2 R_y = 79$ эВ.

Задача 4.3.6. Найдите разность длин волн $\Delta\lambda$ для головных линий серии Бальмера и Лаймана в случае ионов гелия ${}^4\text{He}^+$.

Решение

Согласно обобщенной формуле Бальмера (4.48), длины волн головных линий серий Лаймана и Бальмера для ионов гелия ${}^4\text{He}^+$ равны, соответственно

$$\frac{1}{\lambda_{\text{Ly}\alpha}} = Z^2 R_\infty \left(1 - \frac{1}{2^2} \right) = 4R_\infty \frac{3}{4} = 3R_\infty,$$

$$\frac{1}{\lambda_{H\alpha}} = Z^2 R_\infty \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2} \right) = 4R_\infty \frac{5}{36} = \frac{5}{9} R_\infty.$$

Откуда

$$\Delta\lambda = \lambda_{H\alpha} - \lambda_{Ly\alpha} = \frac{1}{R_\infty} \left(\frac{9}{5} - \frac{1}{3} \right) = \frac{22}{15} \frac{1}{R_\infty} = 133,7 \text{ нм}.$$

Ответ: $\Delta\lambda = \frac{22}{15} \frac{1}{R_\infty} = 133,7 \text{ нм}.$

4.4. Задачи для самостоятельного решения

Задача 4.4.1 (4.3 [1]). Влияние классического излучения на траекторию ускоренно движущегося электрона может быть описано действием силы радиационного трения $\mathbf{F} = \frac{2e^2}{3c^3} \ddot{\mathbf{r}}$. Оцените время излучения τ атома водорода в рамках модели Томсона.

Ответ: $\tau = \frac{3mc^3}{2e^2\omega_0^2}$, где $\omega_0 = \frac{e}{\sqrt{mR^3}}$.

Задача 4.4.2 (4.4 [1]). В рамках модели Томсона найти закон изменения энергии электрона во времени с учетом радиационного захвата.

Ответ: $E(t) = E_0 \exp(-t/\tau)$, где $\tau = \frac{3mc^3}{2e^2\omega_0^2}$, $\omega_0 = \frac{e}{\sqrt{mR^3}}$.

Задача 4.4.3 (4.6 [1]). Оцените максимальный угол рассеяния α -частиц с кинетической энергией $T_\alpha = 5 \text{ МэВ}$ на положительно заряженном шаре (заряд шара $Z|q_e|$, $Z = 79$), радиус которого $R = 10^{-10} \text{ м}$.

Ответ: $\theta_{\max} \approx \frac{2Ze^2}{T_\alpha R} = 4 \cdot 10^{-4}$.

Задача 4.4.4 (4.10 [1]). В опыте Резерфорда производилось облучение тонкой золотой ($Z = 79$) фольги пучком α -частиц с кинетической энергией $T_\alpha = 4,5 \text{ МэВ}$. Экспериментально было

установлено, что небольшое число частиц отклоняется на углы $\geq \pi/2$. Пользуясь этими данными, оцените размер ядра атома.

Ответ: $R \approx \frac{2Ze^2}{T_\alpha} \approx 5 \cdot 10^{-14} \text{ м.}$

Задача 4.4.5 (4.12 [1]). При соударении с ядром атома плутония α -частица с кинетической энергией $T_\alpha = 1 \text{ МэВ}$ отклоняется на угол $\theta = \pi/2$. Определите минимальное расстояние, на которое сблизилась частицы.

Ответ: $r_{\min} = \frac{2Ze^2}{2T_\alpha} \left(1 + \sin^{-1} \left(\frac{\theta}{2} \right) \right) \approx 9,1 \cdot 10^{-13} \text{ м.}$

Задача 4.4.6 (5.3 [1]). Вычислите напряженность E электрического поля на первой боровской орбите в атоме водорода.

Ответ: $E = \frac{|q_e|}{4\pi\epsilon_0 a_0^2} = 5,2 \cdot 10^{11} \text{ В} \cdot \text{м}^{-1}.$

Задача 4.4.7 (3.7 [2]). Какие линии в серии Бальмера атомарного водорода лежат в диапазоне длин волн от 400 до 500 нм.

Ответ: $\lambda_{24} = 486,0 \text{ нм}, \lambda_{25} = 433,9 \text{ нм}, \lambda_{26} = 410,1 \text{ нм.}$

Задача 4.4.8. Согласно классической электродинамике, электрон, вращающийся с частотой ω_0 , излучает на этой же частоте. Пусть электрон в атоме водорода находится на боровской орбите с $n=100$. Найдите отношение χ частоты ω_0 к частоте ω фотона, который излучается при переходе электрона с уровня $n_i=100$ на уровень $n_f=99$. Согласно принципу соответствия, частоты должны совпадать в пределе больших квантовых чисел n .

Ответ: $\chi = \frac{2n^{-3}}{\left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)} = 0,985.$

Задача 4.4.9. В спектре некоторой звезды наблюдаются спектральные серии, аналогичные спектральным сериям атомар-

ного водорода, но с длинами волн в четыре раза короче. Спектр какого элемента наблюдается?

Ответ: He^+ .

Задача 4.4.10 (5.61 [3]). У некоторого водородоподобного иона первый потенциал возбуждения равен $\varphi_1 = 40,8 \text{ В}$. Найти энергию фотона, соответствующего головной линии серии Бальмера для этих ионов.

Ответ: $\hbar\omega_1 = \frac{5}{27}e\varphi_1 = 7,6 \text{ эВ}$.

Задача 4.4.11 (Приложение 3 [2]). Возбужденный атом в состояниях с большими квантовыми числами n называется ридберговским. Найдите для такого атома с $n = 1000$:

а) энергию E_n ;

б) радиус орбиты r_n ;

в) энергию перехода на ближайший уровень ΔE .

Ответ: а) $E_n = -\frac{Ry}{n^2} \approx 10^{-5} \text{ эВ}$, б) $r_n = \frac{\hbar^2}{me^2} n^2 \approx 5 \cdot 10^{-5} \text{ м}$,

в) $\Delta E = Ry \left(\frac{1}{(n-1)^2} - \frac{1}{n^2} \right) \approx 10^{-8} \text{ эВ}$.

Задача 4.4.12 Головная линия какой серии может быть возбуждена фотоном видимого диапазона ($\lambda_{\min} = 400 \text{ нм}$, $\lambda_{\max} = 750 \text{ нм}$) в дважды ионизованном атоме лития Li^{++} ($Z = 3$)?

Ответ: $\lambda_{\min} \leq \left[Z^2 R \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{(n_f + 1)^2} \right) \right]^{-1} \leq \lambda_{\max}$, $n_f = 4$ (серия Брэкета).

Задача 4.4.13 (5.10 [1]). В излучении газоразрядной трубки с неизвестным газом наблюдается серия спектральных линий с длинами волн, определяемыми соотношением:

$$\frac{1}{\lambda_n} = R_\infty \left(1 - \frac{1}{n^2} \right),$$

где $n = 4/3, 5/3, 6/3, 7/3, 8/3, 9/3, \dots$. Определите, каким газом наполнена трубка.

Ответ: Li^{++} , переходы с $n_f = 3$ и $n_i > 3$.

Задача 4.4.14 (5.19 [1]). Найти динамические параметры всех круговых орбит для атома позитрония (e^+e^-): радиусы, скорости, энергии, частоты обращения.

Ответ: $r_n = \frac{2\hbar^2}{me^2} n^2$, $v_n = \frac{e^2}{\hbar} \frac{1}{n}$, $E_n = -\frac{me^4}{4\hbar^2} \frac{1}{n^2}$, $\omega_n = \frac{me^4}{2\hbar^3} \frac{1}{n^3}$,
где $n = 1, 2, 3, \dots$

Задача 4.4.15 (5.23 [1]). Протон и мюон могут образовывать водородоподобную систему, называемую мезоатомом. Масса мюона в 207 раз больше массы электрона. Найти радиусы круговых орбит, скорости мюона и уровни энергии этой системы.

Ответ: $r_n = \frac{a_0 n^2}{186}$, $v_\mu = v_e$, $E_n = -\frac{186 \text{ Ry}}{n^2}$, $n = 1, 2, 3, \dots$

Задача 4.4.16. Считая, что электрон в водородоподобном ионе движется вокруг ядра по эллиптическим орбитам, и используя правило квантования Бора–Зоммерфельда, найти уровни энергии водородоподобного иона. Ядро считать бесконечно тяжелым.

Ответ: $E_{n_\phi, n_r} = -\text{Ry} \frac{Z^2}{(n_\phi + n_r)^2}$, $n_r, n_\phi = 1, 2, 3, \dots$

Список литературы

1. Сборник задач по атомной физике. Под ред. С.С. Красильникова, А.М. Попова, О.В. Тихоновой. – М.: Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, 2010. – 217 с.
2. Миронова Г.А., Брандт Н.Н., Салецкий А.М., Поляков О.П., Трубачев О.О. Введение в квантовую физику в вопросах и задачах. – М.: Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, 2012. – 320 с.
3. Иродов И.Е. Задачи по общей физике. Учеб. пособие. – М.: Бином, Владис, 2002. – 448 с.

ГЛАВА 5 ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

5.1. Теоретический материал

1. Амплитуды вероятности и волновые функции. Используя обозначения Дирака, состояние квантово-механической системы можно записать в виде $|\psi\rangle$, где ψ – полный набор наблюдаемых, т.е. максимально возможное число физических величин, характеризующих данную систему, которые могут быть одновременно определены. Обычно в скобках Дирака указывают только те величины, которые представляют интерес для решения конкретной задачи. Например, $|\mathbf{r}\rangle$ обозначает состояние частицы, в котором она находится в точке с радиус-вектором \mathbf{r} .

С точки зрения математики состояние $|\psi\rangle$ представляет собой вектор в комплексном линейном пространстве. Скалярное произведение двух векторов $|\psi\rangle$ и $|\chi\rangle$ обозначается, как $\langle\chi|\psi\rangle$ и называется *амплитудой вероятности*. Амплитуда вероятности имеет простой физический смысл. Если в результате внешнего воздействия или временной эволюции система может перейти из начального состояния $|\psi\rangle$ в конечное состояние $|\chi\rangle$, то вероятность такого перехода равна

$$P(\psi \rightarrow \chi) = |\langle\chi|\psi\rangle|^2.$$

В линейном векторном пространстве всегда можно построить ортонормированную систему базисных векторов. Мы будем обозначать базисные векторы $|i\rangle$, если i пробегает дискретный набор значений, или $|\xi\rangle$, если ξ изменяется непрерывно. Тогда основные свойства амплитуд вероятности можно записать следующим образом:

$$\begin{aligned} \langle i|j\rangle &= \delta_{ij} \quad \text{или} \quad \langle \xi|\xi'\rangle = \delta(\xi - \xi'); \\ \langle \chi|\psi\rangle &= \sum_i \langle \chi|i\rangle \langle i|\psi\rangle \quad \text{или} \quad \langle \chi|\psi\rangle = \int \langle \chi|\xi\rangle \langle \xi|\psi\rangle d\xi; \end{aligned}$$

$$\langle \chi|\psi\rangle^* = \langle \psi|\chi\rangle,$$

где δ_{ij} – символ Кронекера, а $\delta(\xi - \xi')$ – дельта-функция Дирака.

Волновой функцией частицы в координатном представлении называется амплитуда вероятности $\psi(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \psi \rangle$, т.е. амплитуда вероятности того, что частица в состоянии $|\psi\rangle$ может быть обнаружена в точке \mathbf{r} . Аналогично можно определить волновую функцию в любом другом представлении. Например, волновая функция в импульсном представлении $\psi(\mathbf{p}) = \langle \mathbf{p} | \psi \rangle$.

Из свойств амплитуд вероятности следуют свойства волновых функций. Перечислим их для волновых функций в координатном представлении в одномерном случае.

Условие нормировки:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1 \quad \text{или} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_{\xi}^*(x) \psi_{\xi'}(x) dx = \delta(\xi - \xi').$$

Если волновая функция нормирована на единицу, то квадрат модуля волновой функции $|\psi(x)|^2$ имеет смысл плотности вероятности $\rho(x)$ обнаружения частицы в окрестности точки x . Если же волновая функция нормирована на δ -функцию, то у нее остается следующая вероятностная интерпретация:

$$\frac{P(X_1)}{P(X_2)} = \frac{\int_{X_1} |\psi(x)|^2 dx}{\int_{X_2} |\psi(x)|^2 dx},$$

т.е. отношение вероятностей обнаружения частицы в областях X_1 и X_2 равно отношению интегралов от $|\psi(x)|^2$ по этим областям.

Принцип суперпозиции:

$$\psi(x) = \sum_i a_i \psi_i(x) \quad \text{или} \quad \psi(x) = \int a_{\xi} \psi_{\xi}(x) d\xi,$$

где $\psi_i(x)$ и $\psi_{\xi}(x)$ – волновые функции базисных состояний, а $a_i = \langle i | \psi \rangle$ и $a_{\xi} = \langle \xi | \psi \rangle$ – амплитуды вероятности обнаружения частицы в базисном состоянии. Из принципа суперпозиции, в частности, следует, что все уравнения, которым удовлетворяют волновые функции, должны быть линейными.

Если известны волновые функции начального $\psi(x)$ и конечного $\chi(x)$ состояний, то амплитуда вероятности $\langle \chi | \psi \rangle$ может быть вычислена следующим способом:

$$\langle \chi | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \chi^*(x) \psi(x) dx.$$

Зная волновую функцию частицы в одном представлении, легко получить волновую функцию в любом другом представлении. Например, волновые функции частиц в координатном и импульсном представлении связаны соотношениями (см. задачу 5.2.4):

$$\psi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar} px} dx,$$

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(p) e^{\frac{i}{\hbar} px} dp.$$

2. Операторы физических величин. Каждой наблюдаемой физической величине можно поставить в соответствие оператор таким образом, чтобы собственные значения оператора совпадали с результатами независимых измерений этой величины. Конкретный вид оператора зависит от представления, в котором мы работаем. Будем рассматривать только операторы в координатном представлении, т.е. операторы, которые действуют на волновые функции в координатном представлении. Рассмотрим некоторые свойства операторов физических величин.

Из принципа суперпозиции следует, что оператор \hat{A} физической величины A должен быть *линейным*, т.е. должны выполняться соотношения:

$$\hat{A}(\psi_1 + \psi_2) = \hat{A}\psi_1 + \hat{A}\psi_2,$$

$$\hat{A}(c\psi) = c\hat{A}\psi,$$

где ψ , ψ_1 и ψ_2 – волновые функции, а c – произвольная комплексная постоянная.

Зная волновую функцию частицы $\psi(x)$ в некотором состоянии, можно вычислить среднее значение $\langle A \rangle$ физической величины A по формуле:

$$\langle A \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \hat{A} \psi(x) dx.$$

Дисперсия D_A физической величины A равна

$$D_A = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2, \text{ где } \langle A^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \hat{A}^2 \psi(x) dx.$$

Заметим, что если $\psi(x) = \psi_i(x)$ – собственная функция оператора \hat{A} , т.е. $\hat{A}\psi_i(x) = A_i\psi_i(x)$, где A_i – собственные значения оператора \hat{A} , то $\langle A \rangle = A_i$ и $D_A = 0$. Это означает, что измерение физической величины A в состоянии $\psi_i(x)$ с достоверностью приводит к значению A_i .

Оператор \hat{A}^+ называется *эрмитово сопряженным* к оператору \hat{A} , если для любых квадратично интегрируемых функций $\psi(x)$ и $\varphi(x)$ выполняется равенство:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(x) \hat{A}^+ \psi(x) dx = \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \hat{A} \varphi(x) dx \right]^*.$$

Если $\hat{A}^+ = \hat{A}$, то оператор называется *эрмитовым*, или *самосопряженным*. Среднее значение $\langle A \rangle$ физической величины A должно быть вещественным. Отсюда следует, что *операторы физических величин должны быть эрмитовыми*.

Важным следствием эрмитовости операторов является теорема, согласно которой собственные функции $\psi_i(x)$ (или $\psi_\xi(x)$) эрмитового оператора \hat{A} , соответствующие различным собственным значениям, ортогональны, т.е.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_i^*(x) \psi_j(x) dx = \delta_{ij} \quad \text{или} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_\xi^*(x) \psi_{\xi'}(x) dx = \delta(\xi - \xi').$$

Если одному собственному значению соответствует несколько собственных функций, то они могут быть ортогонализованы, например, с помощью процедуры Грама–Шмидта. Потому в качестве базисных волновых функций можно использовать собственные функции оператора любой физической величины.

Возможность одновременного точного измерения физических величин A и B напрямую связана со свойствами их операторов.

Чтобы величины A и B были измеримы одновременно, необходимо и достаточно, чтобы их операторы коммутировали, т.е. $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$. Оператор $[\hat{A}, \hat{B}]$ называется коммутатором операторов \hat{A} и \hat{B} .

Отметим, что вид операторов и их собственных функций зависит от выбора представления, в котором они рассматриваются. В то же время, собственные значения операторов и алгебраические соотношения между операторами, такие как коммутаторы, во всех представлениях одинаковы.

Рассмотрим теперь операторы конкретных физических величин в координатном представлении.

Оператор координаты:

$$\hat{x} = x.$$

Оператор импульса:

$$p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}; \quad \mathbf{p} = -i\hbar \nabla.$$

Между операторами координаты и импульса существует важное коммутационное соотношение (см. **задачу 5.2.9**):

$$[\hat{p}_i, \hat{x}_j] = -i\hbar \delta_{ij},$$

где $x_i = x, y, z$ и $p_i = p_x, p_y, p_z$. В частности, отсюда следует, что проекции радиус-вектора и импульса на одну и ту же ось не могут быть точно измерены одновременно (соотношение неопределенностей Гейзенберга: $\Delta p_x \Delta x \sim \hbar$).

Оператор полной энергии:

$$\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}.$$

Оператор момента импульса:

$$\hat{\mathbf{L}} = [\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}] = -i\hbar [\mathbf{r} \times \nabla].$$

В декартовых координатах операторы проекций момента импульса имеют вид:

$$\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y = -i\hbar y \frac{\partial}{\partial z} + i\hbar z \frac{\partial}{\partial y},$$

$$\hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z = -i\hbar z \frac{\partial}{\partial x} + i\hbar x \frac{\partial}{\partial z},$$

$$\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x = -i\hbar x \frac{\partial}{\partial y} + i\hbar y \frac{\partial}{\partial x}.$$

Эти выражения можно объединить в одно, используя единичный антисимметричный тензор Леви-Чивиты ϵ_{ijk} :

$$L_i = \epsilon_{ijk} \hat{x}_j \hat{p}_k = -i\hbar \epsilon_{ijk} x_j \frac{\partial}{\partial x_k},$$

где $L_i = L_x, L_y, L_z$, $x_i = x, y, z$ и $p_i = p_x, p_y, p_z$. Здесь предполагается суммирование по повторяющимся индексам j и k (соглашение Эйнштейна). Тензор ϵ_{ijk} полностью определяется следующими свойствами:

$$\epsilon_{123} = 1 \quad \epsilon_{ijk} = -\epsilon_{jik} \quad \epsilon_{ijk} = \epsilon_{kij}.$$

Отсюда, в частности, следует, что компоненты тензора ϵ_{ijk} с повторяющимися индексами равны нулю. Таким образом, тензор ϵ_{ijk} состоит из 0, 1, -1. Полезно также запомнить следующее свойство произведения двух тензоров Леви-Чивиты:

$$\epsilon_{ijk} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} = \begin{vmatrix} \delta_{i\alpha} & \delta_{i\beta} & \delta_{i\gamma} \\ \delta_{j\alpha} & \delta_{j\beta} & \delta_{j\gamma} \\ \delta_{k\alpha} & \delta_{k\beta} & \delta_{k\gamma} \end{vmatrix}.$$

Откуда следуют полезные свойства свёртки тензоров:

$$\epsilon_{ijk} \epsilon_{i\beta\gamma} = \delta_{j\beta} \delta_{k\gamma} - \delta_{k\beta} \delta_{j\gamma} \quad \epsilon_{ijk} \epsilon_{ij\gamma} = 2\delta_{k\gamma} \quad \epsilon_{ijk} \epsilon_{ijk} = 6.$$

Используя коммутационное соотношение $[\hat{p}_i, \hat{x}_j] = -i\hbar \delta_{ij}$ и свойства тензора ϵ_{ijk} , можно доказать следующие коммутационные соотношения:

$$\begin{aligned} [\hat{L}_i, \hat{x}_j] &= i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{x}_k, & [\hat{L}_i, \hat{p}_j] &= i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{p}_k, \\ [\hat{L}_i, \hat{L}_j] &= i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{L}_k, & [\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_i] &= 0, \end{aligned}$$

где $\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$. Последние два коммутационных соотношения говорят о том, что можно одновременно измерить квадрат момента импульса и только одну из его проекций (обычно говорят о проекции на ось z).

В сферических координатах операторы \hat{L}_z и $\hat{\mathbf{L}}^2$ имеют следующий вид:

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad \text{и} \quad \hat{\mathbf{L}}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right].$$

Собственные значения этих операторов равны

$$\mathbf{L}^2 = \hbar^2 l(l+1) \quad \text{и} \quad L_z = \hbar m,$$

где $l = 0, 1, 2, \dots, \infty$, $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$.

5.2. Задачи с решениями

Задача 5.2.1. Рассмотрим мысленный эксперимент по интерференции частиц на двух щелях (рис. 5.1). Пусть частицы массы m вылетают из точечного источника S с одинаковой

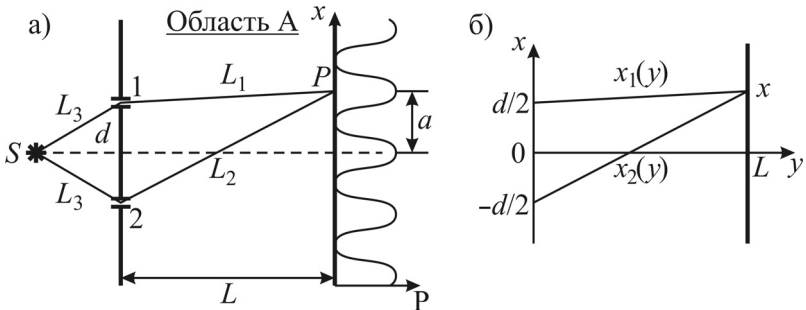


Рис. 5.1. Интерференция частиц на двух щелях: общая схема мысленного эксперимента (а) и альтернативные траектории частицы (б).

скоростью $v \ll c$. Частицы могут пролететь либо через щель 1, либо через щель 2 в первом экране. Щели можно считать бесконечно узкими и расположенными симметрично относительно источника S на расстоянии d друг от друга. Пролетев область A между экранами, частицы попадают на второй экран, где они могут быть зарегистрированы. При этом вероятность обнаружения частиц на экране оказывается не однородной, а имеет характерные для интерференционной картины максимумы, расстояние между которыми равно a . Расстояние между экранами L значительно превышает расстояния d и a ($L \gg d$ и $L \gg a$). Частица, испущенная точечным источником, описывается сферической

волной де Бройля, поэтому амплитуда вероятности (с точностью до несущественного для данной задачи множителя) того, что частица, вылетевшая из точки \mathbf{r}_1 , будет обнаружена в точке \mathbf{r}_2 , равна

$$\langle \mathbf{r}_2 | \mathbf{r}_1 \rangle = \frac{1}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|} \exp\left(\frac{i}{\hbar} p |\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|\right). \text{ Найти: а) расстояние } a \text{ между}$$

максимумами вероятности; б) положение x_0 центрального максимума, если в области A на частицы действует слабая сила F , направленная вдоль оси x .

Решение

Согласно свойствам амплитуд вероятностей, амплитуда вероятности того, что вылетевшая из источника S частица попадет в точку P на втором экране, равна

$$\langle P | S \rangle = \langle P | 1 \rangle \langle 1 | S \rangle + \langle P | 2 \rangle \langle 2 | S \rangle.$$

Поскольку по условию задачи щели 1 и 2 расположены симметрично относительно источника S , то амплитуды вероятности $\langle 1 | S \rangle$ и $\langle 2 | S \rangle$ равны друг другу:

$$\langle 1 | S \rangle = \langle 2 | S \rangle = \frac{1}{L_3} \exp\left(\frac{i}{\hbar} p_0 L_3\right) \equiv C,$$

где $p_0 = mv$ – импульс частицы, L_3 – расстояние от источника S до щелей. Тогда амплитуду вероятности $\langle P | S \rangle$ можно записать в виде:

$$\langle P | S \rangle = C \left[\frac{1}{L_1} \exp\left(\frac{i}{\hbar} p_0 L_1\right) + \frac{1}{L_2} \exp\left(\frac{i}{\hbar} p_0 L_2\right) \right], \quad (5.1)$$

где L_1 и L_2 – расстояния от точки P до щелей 1 и 2 соответственно. Как видно из рис. 5.1, в силу условий задачи ($L \gg d$ и $L \gg a$) предэкспоненциальные множители можно считать равными

$$\frac{1}{L_1} \approx \frac{1}{L_2} \approx \frac{1}{L}.$$

Тогда выражение (5.1) для амплитуды вероятности $\langle P | S \rangle$ можно приближенно записать в виде:

$$\langle P | S \rangle \approx \frac{C}{L} \left[\exp\left(\frac{i}{\hbar} p_0 L_1\right) + \exp\left(\frac{i}{\hbar} p_0 L_2\right) \right].$$

Отсюда вероятность обнаружения частицы в точке P равна

$$P = |\langle P|S \rangle|^2 = \langle P|S \rangle^* \langle P|S \rangle \approx \frac{2|C|^2}{L^2} \left[1 + \cos \left(\frac{p_0(L_2 - L_1)}{\hbar} \right) \right]. \quad (5.2)$$

Вероятность P максимальна при условии:

$$\frac{p_0(L_2 - L_1)}{\hbar} = 2\pi n, \quad (5.3)$$

где n – целое число.

Найдем связь координаты x точки P с разностью $(L_2 - L_1)$. Из рис. 5.1 видно, что

$$L_2^2 - L_1^2 = \left(L^2 + \left(x + \frac{d}{2} \right)^2 \right) - \left(L^2 + \left(x - \frac{d}{2} \right)^2 \right) = 2xd.$$

С другой стороны, $L_2^2 - L_1^2 = (L_2 - L_1)(L_2 + L_1) \approx 2L(L_2 - L_1)$, откуда

$$(L_2 - L_1) = \frac{xd}{L}. \quad (5.4)$$

Если точка P находится в n -ом максимуме, то $x = an$. Тогда из (5.3) и (5.4) получим:

$$a = \frac{L}{d} \cdot \frac{2\pi\hbar}{p_0} = \frac{L\lambda}{d},$$

где λ – длина волны де Бройля частиц. Обратим внимание на то, что мы получили хорошо известный из оптики результат для случая интерференции света на двух щелях. Однако, решение задачи в таком виде пригодно для любых частиц с импульсом p_0 , как безмассовых (фотоны), так и массивных. Полученный результат имеет чисто квантово-механическую природу. Легко убедиться в том, что если суммировать не амплитуды вероятностей, а сами вероятности, то никакого интерференционного члена не получится.

Если в области A на частицу действует сила F , направленная вдоль оси x , то кинетическая энергия частицы будет зависеть от координаты x :

$$T(x) - T(0) = U(0) - U(x) \approx -x \frac{dU(x)}{dx} = Fx, \quad (5.5)$$

где T и U – кинетическая и потенциальная энергия частицы. Если сила F достаточно слабая, то импульс частицы будет изменяться не значительно, т.е.

$$T(x) - T(0) = \frac{1}{2m} (p^2(x) - p_0^2) \approx \frac{p_0}{m} (p(x) - p_0) = v(p(x) - p_0). \quad (5.6)$$

Как видно из (5.5) и (5.6), действие силы F приводит к изменению импульса частицы:

$$p(x) \approx p_0 + \frac{Fx}{v}. \quad (5.7)$$

Изменение импульса частицы приводит к появлению дополнительного сдвига фаз у амплитуд вероятности $\langle P|1 \rangle$ и $\langle P|2 \rangle$. Чтобы вычислить эти сдвиги фаз, введем дополнительно ось y в направлении от первого экрана ко второму (см. рис. 5.1). Траектории, по которым частица может попасть в точку P с координатой x , вылетов из первой и второй щели, задаются линейными функциями

$$x_1(y) = \frac{d}{2} + \left(x - \frac{d}{2}\right) \frac{y}{L} \quad \text{и} \quad x_2(y) = -\frac{d}{2} + \left(x + \frac{d}{2}\right) \frac{y}{L}.$$

Для амплитуды вероятности $\langle P|1 \rangle$ сдвиг фазы на бесконечно малом расстоянии dy равен

$$d\varphi_1 = \frac{1}{\hbar} (p(x) - p_0) dy.$$

Тогда, используя (5.7), можно вычислить полный сдвиг фазы для амплитуды вероятности $\langle P|1 \rangle$:

$$\Delta\varphi_1 = \frac{1}{\hbar} \int_0^L (p(x_1(y)) - p_0) dy \approx \frac{F}{\hbar v} \int_0^L x_1(y) dy = \frac{F}{\hbar v} \left[\frac{xL}{2} + \frac{Ld}{4} \right]. \quad (5.8)$$

Аналогично, сдвиг фазы для амплитуды вероятности $\langle P|2 \rangle$ равен

$$\Delta\varphi_2 = \frac{F}{\hbar v} \left[\frac{xL}{2} - \frac{Ld}{4} \right]. \quad (5.9)$$

Запишем теперь амплитуду вероятности $\langle P|S \rangle$ с учетом (5.8) и (5.9):

$$\langle P|S \rangle \approx \frac{C}{L} \left[\exp\left(\frac{i}{\hbar} p_0 L_1 + i\Delta\varphi_1\right) + \exp\left(\frac{i}{\hbar} p_0 L_2 + i\Delta\varphi_2\right) \right],$$

откуда вероятность обнаружения частицы в точке P равна

$$P = |\langle P|S \rangle|^2 \approx \frac{2|C|^2}{L^2} \left[1 + \cos \left(\frac{p_0(L_2 - L_1)}{\hbar} + (\Delta\varphi_2 - \Delta\varphi_1) \right) \right]. \quad (5.10)$$

Центральный максимум вероятности соответствует нулевому аргументу косинуса в (5.10), т.е.

$$\Delta\varphi_1 - \Delta\varphi_2 = \frac{p_0(L_2 - L_1)}{\hbar} = \frac{p_0}{\hbar} \frac{x_0 d}{L}, \quad (5.11)$$

где x_0 – положение центрального максимума. Выражая x_0 из (5.11) и используя (5.8) и (5.9), получим:

$$x_0 = (\Delta\varphi_1 - \Delta\varphi_2) \frac{L}{d} \frac{\hbar}{p_0} = \frac{F}{\hbar v} \frac{L d}{2} \frac{L}{d} \frac{\hbar}{p_0} = \frac{1}{2} \frac{F}{m} \left(\frac{L}{v} \right)^2. \quad (5.12)$$

У выражения (5.12) очень простой физический смысл. Заметив, что $\tau = L/v$ – это время пролета частицы через область A , а $a = F/m$ – классическое ускорение частицы, получим хорошо известную из классической физики формулу: $x_0 = a\tau^2/2$.

После того, как получен ответ, легко понять, что означает термин «слабая» сила. При выводе выражения (5.6) мы воспользовались условием $p(x) - p_0 = Fx/v \ll p_0 = mv$, т.е. работа силы F при смещении частицы на расстояние x должна быть много меньше кинетической энергии частицы $Fx \ll mv^2$. Подставляя вместо x смещение центрального максимума x_0 , получим $F \ll mv^2/L$. Если это условие не выполняется, то в полученное выше классическое выражение (5.12) необходимо внести поправки, имеющие квантово-механическую природу.

В заключение подчеркнем, что представление об амплитудах вероятности позволяет получать не только чисто квантово-механические результаты (такие как интерференция), но и результаты чисто классические (такие как отклонение частицы при действии на неё постоянной силы). Рассмотренная задача иллюстрирует тот факт, что квантовая физика не просто дополняет, а обобщает классическую физику.

Ответ: а) $a = \frac{L}{d} \cdot \frac{2\pi\hbar}{mv}$; б) $x_0 = \frac{1}{2} \frac{F}{m} \left(\frac{L}{v} \right)^2$.

Задача 5.2.2. Рассмотрим интерференцию частиц на двух щелях (как в задаче 5.2.1). Будем считать, что источник S

испускает электроны (частицы со спином $1/2$). Пусть амплитуда вероятности прохождения электрона через щели зависит от проекции его спина на ось z : α , если $s_z = +\hbar/2$ (спин вверх), и β , если $s_z = -\hbar/2$ (спин вниз). Вероятность обнаружения частицы в точке P на втором экране будем обозначать P_+ , если источник испускает только электроны со спином вверх, P_- , если источник испускает только электроны со спином вниз, и $P_{\text{неполяр}}$, если источник испускает неполяризованные электроны (со случайным направлением спина). Найти отношение $P_+ : P_- : P_{\text{неполяр}}$.

Решение

Амплитуда вероятности того, что вылетевший из источника S электрон со спином вверх попадет в точку P на втором экране, равна

$$\langle P|S\rangle = \langle P|1\rangle\alpha\langle 1|S\rangle + \langle P|2\rangle\alpha\langle 2|S\rangle.$$

Тогда вероятность P_+ обнаружения электрона в точке P равна

$$P_+ = |\langle P|S\rangle|^2 = |\alpha|^2 |\langle P|1\rangle\langle 1|S\rangle + \langle P|2\rangle\langle 2|S\rangle|^2, \quad (5.13)$$

где величина $|\langle P|1\rangle\langle 1|S\rangle + \langle P|2\rangle\langle 2|S\rangle|^2$ та же самая, что и в задаче **5.2.1** (см. (5.1)). Амплитуда вероятности α учитывает взаимодействие электронов со щелями первого экрана. В предыдущей задаче мы фактически положили эту амплитуду вероятности равной единице.

Аналогично, вероятность P_- обнаружения электрона со спином вниз в точке P равна

$$P_- = |\langle P|S\rangle|^2 = |\beta|^2 |\langle P|1\rangle\langle 1|S\rangle + \langle P|2\rangle\langle 2|S\rangle|^2. \quad (5.14)$$

Для случая, когда источник S испускает неполяризованные электроны (со случайной проекцией спина на ось z), необходимо усреднить вероятность обнаружения электрона по направлениям спина:

$$P_{\text{неполяр}} = \frac{1}{2}P_+ + \frac{1}{2}P_- = \frac{|\alpha|^2 + |\beta|^2}{2} |\langle P|1\rangle\langle 1|S\rangle + \langle P|2\rangle\langle 2|S\rangle|^2. \quad (5.15)$$

Сравнивая (5.13), (5.14) и (5.15), получим:

$$P_+ : P_- : P_{\text{неполярь}} = |\alpha|^2 : |\beta|^2 : \frac{|\alpha|^2 + |\beta|^2}{2}.$$

Замечание. Согласно постулатам квантовой механики необходимо суммировать амплитуды вероятности взаимоисключающих событий, связанных с одной и той же частицей (системой частиц). В данном случае, события «частица прошла через щель 1» и «частица (та же самая) прошла через щель 2» – взаимоисключающие, и нужно суммировать амплитуды вероятностей этих событий. Если же взаимоисключающие события связаны с различными не взаимодействующими друг с другом частицами, то вероятности этих событий суммируются в соответствии с принципами классической физики. В данном случае, события «частица со спином вверх попала в точку P » и «частица со спином вниз попала в точку P » связаны с разными частицами, поэтому мы усредняем вероятности этих событий (а не амплитуды вероятностей!). Еще раз подчеркнем, что явление интерференции связано со свойствами отдельных частиц, а не с их коллективным взаимодействием.

Ответ: $P_+ : P_- : P_{\text{неполярь}} = |\alpha|^2 : |\beta|^2 : \frac{|\alpha|^2 + |\beta|^2}{2}.$

Задача 5.2.3. Показать, что операторы координаты \hat{x} и импульса \hat{p}_x эрмитовы.

Решение

Свойство эрмитовости операторов не зависит от выбора представления, поэтому мы будем рассматривать операторы координаты и импульса в координатном представлении:

$$\hat{x} = x \quad \text{и} \quad \hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}.$$

Чтобы убедиться в том, что оператор \hat{A} эрмитов, нужно доказать соотношение

$$\left[\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(x) \hat{A} \psi(x) dx \right]^* = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \hat{A} \varphi(x) dx \quad (5.16)$$

для любых квадратично интегрируемых функций $\varphi(x)$ и $\psi(x)$.

Для оператора координаты выполнение равенства (5.16) очевидно, поскольку оператор \hat{x} вещественный и коммутирует с любой функцией от x . Действительно,

$$\left[\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(x)x\psi(x)dx \right]^* = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(x)x^* \psi^*(x)dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x)x\varphi(x)dx.$$

Для доказательства эрмитовости оператора \hat{p}_x воспользуемся теоремой об интегрировании по частям:

$$\begin{aligned} \left[-i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(x) \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} dx \right]^* &= i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(x) \frac{\partial \psi^*(x)}{\partial x} dx = \\ &= i\hbar \varphi(x) \psi^*(x) \Big|_{-\infty}^{+\infty} - i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \frac{\partial \varphi(x)}{\partial x} dx. \end{aligned} \quad (5.17)$$

В силу квадратичной интегрируемости, функции $\varphi(x)$ и $\psi(x)$ стремятся к нулю при $x \rightarrow \pm\infty$, поэтому первое слагаемое в равенстве (5.17) обращается в нуль. Сравнивая (5.17) с определением (5.16), видим, что оператор \hat{p}_x эрмитов.

Замечание. Сумма $\hat{A} + \hat{B}$ двух эрмитовых операторов \hat{A} и \hat{B} всегда является эрмитовым оператором, а их произведение $\hat{A}\hat{B}$ является эрмитовым оператором, только если операторы \hat{A} и \hat{B} коммутируют: $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$. Действительно,

$$(\hat{A}\hat{B})^+ = \hat{B}^+ \hat{A}^+ = \hat{B}\hat{A} = \hat{A}\hat{B}.$$

Поэтому оператор момента импульса $\hat{\mathbf{L}} = [\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}]$ также является эрмитовым. Это становится очевидным, если рассмотреть по отдельности его проекции. Например, оператор $\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x$ является эрмитовым, поскольку оператор \hat{x} коммутирует с \hat{p}_y (см. задачу 5.2.9), а \hat{y} соответственно с \hat{p}_x .

Задача 5.2.4. Найти собственные значения и собственные функции операторов координаты \hat{x} и импульса \hat{p}_x .

Решение

Будем рассматривать операторы \hat{x} и \hat{p}_x в координатном представлении. Следует отметить, что если собственные значения

операторов не зависят от выбора представления, то собственные функции одного и того же оператора в различных представлениях различны.

Решим сначала задачу на собственные значения для оператора $\hat{x} = x$:

$$x \cdot \psi_{x'}(x) = x' \cdot \psi_{x'}(x), \quad (5.18)$$

где $\psi_{x'}(x)$ – собственная функция оператора \hat{x} , соответствующая собственному значению x' . Из (5.18) следует, что функция $\psi_{x'}(x)$ равна нулю во всех точках, кроме $x = x'$. При этом в точке $x = x'$ функция $\psi_{x'}(x)$ должна быть неограниченной, иначе

нормировочный интеграл $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_{x'}(x)|^2 dx$ равен нулю. Поскольку

оператор координаты имеет непрерывный спектр собственных значений $x' \in (-\infty, +\infty)$, то собственные функции $\psi_{x'}(x)$ должны быть нормированы условием:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_{x'}^*(x) \psi_{x''}(x) dx = \delta(x' - x'').$$

Легко показать, что всем перечисленным выше условиям удовлетворяет функция

$$\psi_{x'}(x) = e^{i\alpha} \delta(x - x'), \quad (5.19)$$

где α – вещественная константа. Действительно, δ -функция Дирака отлична от нуля и не ограничена лишь в точке $x = x'$. Кроме того,

$$\left| e^{i\alpha} \right|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - x') \delta(x - x'') dx = \delta(x' - x'').$$

Константу α в выражении (5.19) можно выбрать произвольным образом. Обычно полагают, что $\alpha = 0$. Таким образом, окончательно получим:

$$\psi_{x'}(x) = \delta(x - x').$$

Решим теперь задачу на собственные значения оператора \hat{p}_x :

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi_p(x) = p \cdot \psi_p(x). \quad (5.20)$$

Уравнение (5.20) решается методом разделения переменных:

$$\frac{d\psi_p}{\psi_p} = \frac{i}{\hbar} p dx \Rightarrow \ln\left(\frac{\psi_p}{C}\right) = \frac{i}{\hbar} px \Rightarrow \psi_p(x) = C e^{\frac{i}{\hbar} px},$$

где C – комплексная постоянная. Собственные значения p принимают непрерывный спектр значений в интервале $(-\infty, +\infty)$, поэтому собственные функции $\psi_p(x)$ должны быть нормированы условием:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_p^*(x) \psi_{p'}(x) dx = \delta(p - p'),$$

из которого можно найти константу C :

$$|C|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{i}{\hbar}(p'-p)x} dx = |C|^2 \cdot 2\pi\hbar \cdot \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(p'-p)\frac{x}{\hbar}} d\frac{x}{\hbar} = |C|^2 \cdot 2\pi\hbar \cdot \delta(p - p'),$$

откуда

$$2\pi\hbar |C|^2 = 1 \Rightarrow C = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\alpha},$$

где α – произвольная вещественная постоянная. Выбирая $\alpha = 0$, получим:

$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} px}. \quad (5.21)$$

Замечания.

1. Волна де Бройля

$$\Psi(x, t) = \text{const} \cdot \exp\left[\frac{i}{\hbar}(px - Et)\right]$$

является собственной функцией оператора импульса \hat{p}_x . Поэтому вычисление среднего значения и дисперсии импульса в таком состоянии приводит к простому результату: $\langle p_x \rangle = p$ и $D_{p_x} = 0$, то есть, волна де Бройля действительно описывает частицу, движущуюся с постоянным импульсом вдоль оси x .

2. Полученная волновая функция $\psi_p(x)$ – это ни что иное как амплитуда вероятности $\langle x|p \rangle$ обнаружить частицу с импульсом p в точке x . Поэтому можно сразу написать волновую функцию оператора \hat{x} в импульсном представлении:

$$\Psi_x(p) = \langle p|x \rangle = \langle x|p \rangle^* = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar}px}. \quad (5.22)$$

Используя амплитуды вероятности (5.21) и (5.22), можно получить формулы для преобразования волновой функции из координатного представления в импульсное и обратно:

$$\Psi(p) = \langle p|\Psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle p|x \rangle \langle x|\Psi \rangle dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar}px} dx,$$

$$\Psi(x) = \langle x|\Psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle x|p \rangle \langle p|\Psi \rangle dp = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(p) e^{\frac{i}{\hbar}px} dp.$$

Ответ: $\Psi_{x'}(x) = \delta(x - x')$, $x' \in (-\infty, \infty)$; $\Psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}px}$,
 $p \in (-\infty, \infty)$.

Задача 5.2.5. Найти собственные значения и собственные функции оператора z-проекции момента импульса \hat{L}_z .

Решение

Рассмотрим задачу на собственные значения оператора \hat{L}_z в координатном представлении в сферических координатах:

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \Psi(r, \theta, \varphi) = L_z \cdot \Psi(r, \theta, \varphi). \quad (5.23)$$

Дифференциальное уравнение (5.23) аналогично уравнению (5.20) с точностью до замены $p \rightarrow L_z$ и $x \rightarrow \varphi$. Поэтому можно сразу написать его решение:

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = \chi(r, \theta) \cdot \exp\left(\frac{i}{\hbar} L_z \varphi\right), \quad (5.24)$$

где функция $\chi(r, \theta)$ не зависит от угла φ . Однако, в отличие от собственных значений оператора импульса, собственные значения L_z могут принимать только дискретный набор значений. Это связано с тем, что физические свойства системы не должны изменяться при повороте системы координат на угол $\varphi = 2\pi$. Следовательно, что на волновые функции должно быть наложено дополнительное условие:

$$\Psi(r, \theta, \varphi + 2\pi) = \Psi(r, \theta, \varphi). \quad (5.25)$$

Из (5.24) и (5.25) следует, что

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

где m – целое число. Таким образом,

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \chi(r, \theta) \cdot \exp(im\varphi) \equiv \chi(r, \theta) \cdot \psi_m(\varphi),$$

где $\psi_m(\varphi) = \text{const} \cdot \exp(im\varphi)$ – собственные функции оператора \hat{L}_z , соответствующие собственным значениям $L_z = m\hbar$. Поскольку оператор \hat{L}_z имеет дискретный набор собственных значений, волновые функции $\psi_m(\varphi)$ должны быть нормированы на единицу:

$$1 = \int_0^{2\pi} |\psi_m(\varphi)|^2 d\varphi = |\text{const}|^2 \cdot 2\pi.$$

Выбирая фазу комплексной константы равной нулю, окончательно получим:

$$\psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}. \quad (5.26)$$

При этом волновые функции $\psi_m(\varphi)$ ортонормированы, т.е.

$$\int_0^{2\pi} \psi_m^*(\varphi) \psi_n(\varphi) d\varphi = \delta_{mn},$$

какими и полагается быть собственным функциям эрмитового оператора.

Ответ: $\psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}$, $L_z = m\hbar$, $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

Задача 5.2.6. Пусть волновая функция частицы в сферических координатах в некоторый момент времени имеет вид:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \chi(r, \theta) \cos^2 \varphi.$$

Какие значения проекции момента импульса L_z частицы могут быть измерены и с какой вероятностью? Чему равны среднее значение $\langle L_z \rangle$ и дисперсия D_{L_z} ?

Решение

Представим волновую функцию частицы в виде:

$$\psi(\varphi) = \langle \varphi | \psi \rangle = \sum_m \langle \varphi | m \rangle \langle m | \psi \rangle = \sum_m C_m \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}, \quad (5.27)$$

где $\langle \varphi | m \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}$ – собственные функции (5.26) оператора \hat{L}_z ,

соответствующие собственным значениям $L_z = m\hbar$, а $C_m = \langle m | \psi \rangle$ – амплитуда вероятности обнаружения частицы в состоянии с проекцией момента импульса $L_z = m\hbar$. Обратим внимание на то, что при решении данной задачи нас не интересует часть волновой функции $\chi(r, \theta)$, которая не зависит от угла φ . При этом не надо забывать, что амплитуды вероятности должны быть нормированы условием $\sum_m |C_m|^2 = 1$.

Используя известное представление косинуса через экспоненты, получим:

$$\cos^2 \varphi = \left(\frac{e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}}{2} \right)^2 = \frac{1}{4} (e^{i2\varphi} + 2e^{i0\varphi} + e^{i(-2)\varphi}). \quad (5.28)$$

Из (5.27) и (5.28) следует, что в данном состоянии могут быть измерены следующие значения L_z : $2\hbar$, 0 и $-2\hbar$ с амплитудами вероятности $C_2 = a$, $C_0 = 2a$ и $C_{-2} = a$ соответственно. Нормировочный коэффициент a находится из условия:

$$\sum_m |C_m|^2 = |C_2|^2 + |C_0|^2 + |C_{-2}|^2 = 6|a|^2 = 1.$$

Считая, что коэффициент a – вещественный и положительный, получим: $C_2 = 1/\sqrt{6}$, $C_0 = 2/\sqrt{6}$ и $C_{-2} = 1/\sqrt{6}$. Таким образом, вероятности измерения проекций момента импульса $L_z = 2\hbar, 0, -2\hbar$ равны соответственно $P_2 = 1/6$, $P_0 = 2/3$ и $P_{-2} = 1/6$.

Наконец,

$$\langle L_z \rangle = \sum_m P_m (L_z)_m = \frac{1}{6}(2\hbar) + \frac{2}{3}(0\hbar) + \frac{1}{6}(-2\hbar) = 0$$

и

$$\begin{aligned} D_{L_z} &= \langle L_z^2 \rangle - \langle L_z \rangle^2 = \langle L_z^2 \rangle = \sum_m P_m (L_z)_m^2 = \\ &= \frac{1}{6}(2\hbar)^2 + \frac{2}{3}(0\hbar)^2 + \frac{1}{6}(-2\hbar)^2 = \frac{4}{3}\hbar^2. \end{aligned}$$

Ответ: $L_z = 2\hbar, 0, -2\hbar$, $P_2 = P_{-2} = 1/6$, $P_0 = 2/3$, $\langle L_z \rangle = 0$,
 $D_{L_z} = \frac{4}{3}\hbar^2$.

Задача 5.2.7. Найти собственные функции оператора энергии \hat{E} .

Решение

Задача на собственные значения оператора \hat{E} имеет вид:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_E(\mathbf{r}, t) = E \cdot \Psi_E(\mathbf{r}, t). \quad (5.29)$$

Также как и в задачах 5.2.4 и 5.2.5, переменные разделяются, и уравнение (5.29) легко интегрируется:

$$\frac{d\Psi_E}{\Psi_E} = -\frac{i}{\hbar} E dt \Rightarrow \Psi_E(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E t}, \quad (5.30)$$

где функция $\psi(\mathbf{r})$ не зависит от времени. Нормировка волновой функции $\Psi_E(\mathbf{r}, t)$, а также спектр энергий E зависят от вида функции $\psi(\mathbf{r})$.

Замечания.

1. Энергия системы, описываемой волновой функцией вида (5.30), сохраняется ($\langle E \rangle = E$ и $D_E = 0$), поэтому говорят, что система находится в *стационарном* состоянии.

2. Волна де Бройля

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \text{const} \cdot \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\mathbf{r} - Et)\right]$$

является частным случаем волновой функции стационарного состояния и описывает частицу с постоянными энергией и импульсом (см. задачу 5.2.4).

Ответ: $\Psi_E(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E t}$.

Задача 5.2.8. Частица может находиться в одном из двух стационарных состояний с энергиями $E_2 > E_1$. Волновые функции частицы в этих состояниях равны $\Psi_{1,2}(x, t) = \psi_{1,2}(x) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_{1,2} t\right)$.

Регистрация частицы осуществляется детектором. Амплитуда вероятности обнаружения частицы детектором равна

$$C_{1,2} = \langle \chi | \Psi_{1,2} \rangle = \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \chi^*(x) \Psi(x) dx \right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_{1,2} t\right) \equiv a_{1,2} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_{1,2} t\right),$$

где $\chi(x)$ – волновая функция частицы в детекторе.

Считая независимые от времени амплитуды вероятности $a_{1,2}$ вещественными и отличными от нуля, определить вероятность обнаружения частицы в нестационарных состояниях* с волновыми функциями $\Psi_I = (\Psi_1 + i\Psi_2)/\sqrt{2}$ и $\Psi_{II} = (\Psi_1 - i\Psi_2)/\sqrt{2}$.

Решение

Согласно условию задачи, амплитуды вероятности обнаружения частицы в нестационарных состояниях равны

$$C_I = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[a_1 e^{-\frac{i}{\hbar} E_1 t} + i a_2 e^{-\frac{i}{\hbar} E_2 t} \right] \quad \text{и} \quad C_{II} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[a_1 e^{-\frac{i}{\hbar} E_1 t} - i a_2 e^{-\frac{i}{\hbar} E_2 t} \right].$$

Найдем вероятность обнаружения частицы, находящейся в первом состоянии:

$$\begin{aligned} P_I = |C_I|^2 &= \frac{1}{2} \left[a_1^2 + a_2^2 - i a_1 a_2 \left(e^{\frac{i}{\hbar}(E_2 - E_1)t} - e^{-\frac{i}{\hbar}(E_2 - E_1)t} \right) \right] = \\ &= \frac{1}{2} \left[a_1^2 + a_2^2 + 2 a_1 a_2 \sin\left(\frac{(E_2 - E_1)t}{\hbar}\right) \right]. \end{aligned}$$

Аналогично, вероятность обнаружения частицы во втором нестационарном состоянии равна

$$P_{II} = |C_{II}|^2 = \frac{1}{2} \left[a_1^2 + a_2^2 - 2 a_1 a_2 \sin\left(\frac{(E_2 - E_1)t}{\hbar}\right) \right].$$

Видно, что вероятности P_I и P_{II} зависят от времени (см. рис. 5.2), причем максимумы вероятности P_I совпадают с минимумами P_{II} , и наоборот. Время, за которое вероятность P_I убывает от своего максимального значения до минимального, равно

* Вероятности обнаружения частицы в стационарных состояниях не зависят от времени и равны $P_{1,2} = a_{1,2}^2$, причем выполняется неравенство $a_1^2 + a_2^2 \leq 1$.

$$\tau = \frac{\pi\hbar}{E_2 - E_1}. \quad (5.31)$$

Можно считать, что τ – это время жизни частицы в состоянии с волновой функцией Ψ_I (или Ψ_{II}). С другой стороны, частица в нестационарном состоянии не обладает определенной энергией. По порядку величины неопределенность энергии ΔE равна $(E_2 - E_1)$. Поэтому из (5.31) следует важное соотношение, называемое *соотношением неопределенностей для энергии и времени*:

$$\Delta E \cdot \tau \sim \hbar.$$

Ответ:
$$P_{I,II} = \frac{1}{2} \left[a_1^2 + a_2^2 \pm 2a_1a_2 \sin\left(\frac{(E_2 - E_1)t}{\hbar}\right) \right].$$

Задача 5.2.9. Вычислить коммутатор операторов координаты \hat{x} и импульса \hat{p}_x .

Решение

Для вычисления коммутатора $[\hat{p}_x, \hat{x}] \equiv \hat{p}_x \hat{x} - \hat{x} \hat{p}_x$ в координатном представлении подействуем им на произвольную дифференцируемую функцию $\varphi(x)$:

$$[\hat{p}_x, \hat{x}]\varphi(x) = -i\hbar \left(\frac{d(x\varphi(x))}{dx} - x \frac{d\varphi(x)}{dx} \right) = -i\hbar\varphi(x).$$

Поскольку данное соотношение получено для произвольной функции $\varphi(x)$, можно написать операторное равенство:

$$[\hat{p}_x, \hat{x}] = -i\hbar. \quad (5.32)$$

Видно, что операторы \hat{p}_x и \hat{x} не коммутируют, поэтому координата x и проекция импульса p_x не могут быть измерены одновременно.

Аналогичные вычисления можно провести и для других пар координат и проекций импульса, например,

$$[\hat{p}_x, \hat{y}]\varphi(x) = -i\hbar \left(\frac{d(y\varphi(x))}{dx} - y \frac{d\varphi(x)}{dx} \right) = 0,$$

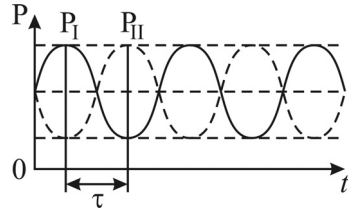


Рис. 5.2. Зависимость вероятностей обнаружения частицы в первом и втором нестационарном состоянии от времени.

откуда $[\hat{p}_x, \hat{y}] = 0$. В общем случае коммутационные соотношения между проекциями импульса и радиус-вектора частицы можно записать в виде

$$[\hat{p}_i, \hat{x}_j] = -i\hbar\delta_{ij}, \quad (5.33)$$

где $x_i = x, y, z$ и $p_i = p_x, p_y, p_z$. При этом коммутационные соотношения между операторами не зависят от конкретного представления операторов.

Ответ: $[\hat{p}_x, \hat{x}] = -i\hbar$.

Задача 5.2.10. Вычислить коммутатор операторов проекций момента импульса $[\hat{L}_i, \hat{L}_j]$.

Решение

Используя определение оператора момента импульса в виде $\hat{L}_i = \varepsilon_{ijk} \hat{x}_j \hat{p}_k$ и свойство коммутатора $[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}$, получим:

$$\begin{aligned} [\hat{L}_i, \hat{L}_j] &= \varepsilon_{imn} \varepsilon_{jlk} [\hat{x}_m \hat{p}_n, \hat{x}_l \hat{p}_k] = \\ &= \varepsilon_{imn} \varepsilon_{jlk} (\hat{x}_m \hat{x}_l [\hat{p}_n, \hat{p}_k] + \hat{x}_m [\hat{p}_n, \hat{x}_l] \hat{p}_k + \hat{x}_l [\hat{x}_m, \hat{p}_k] \hat{p}_n + [\hat{x}_m, \hat{x}_l] \hat{p}_n \hat{p}_k). \end{aligned}$$

Используя коммутационное соотношение (5.33) и свойство тензора Леви-Чивиты:

$$\varepsilon_{ijk} \varepsilon_{kmn} = \delta_{im} \delta_{jn} - \delta_{jm} \delta_{in},$$

получим:

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar (\varepsilon_{imn} \varepsilon_{jlm} \hat{x}_l \hat{p}_n - \varepsilon_{imn} \varepsilon_{jnk} \hat{x}_m \hat{p}_k) = i\hbar (\hat{x}_i \hat{p}_j - \hat{x}_j \hat{p}_i). \quad (5.34)$$

С другой стороны,

$$\varepsilon_{ijk} \hat{L}_k = \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{kmn} \hat{x}_m \hat{p}_n = \hat{x}_i \hat{p}_j - \hat{x}_j \hat{p}_i. \quad (5.35)$$

Сравнивая (5.34) и (5.35), получим:

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{L}_k.$$

Замечание. Операторы различных проекций момента импульса не коммутируют. Это означает, что невозможно одновременно точно измерить любые две (а тем более все три) проекции момента импульса частицы. С другой стороны, операторы \hat{L}_i коммутируют с оператором квадрата момента импульса

\hat{L}^2 (см. задачу 5.4.6), поэтому модуль момента импульса и одна из его проекций (обычно выбирают проекцию на ось z) могут быть одновременно точно измерены.

Ответ: $[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{L}_k$.

Задача 5.2.11. Получить соотношение неопределенностей $\delta x \delta p \geq \frac{\hbar}{2}$, где $\delta x = \sqrt{\langle (x - \bar{x})^2 \rangle}$ и $\delta p = \sqrt{\langle (p - \bar{p})^2 \rangle}$ – средне-квадратичные отклонения координаты и импульса, из очевидного* неравенства

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left| \alpha x \psi(x) + \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} \right|^2 dx \geq 0, \quad (5.36)$$

где α – произвольная вещественная постоянная.

Решение

Для существования интеграла в левой части неравенства (5.36) необходимо, чтобы функции $\psi(x)$ и $\frac{\partial \psi(x)}{\partial x}$ были квадратично интегрируемы. Будем считать, что функция $\psi(x)$ нормирована на единицу, то есть $\psi(x)$ – волновая функция частицы, совершающей финитное движение в некотором потенциале. Кроме того, для простоты вычислений будем считать, что $\bar{x} = 0$ и $\bar{p} = 0$. Этого всегда можно добиться с помощью замены переменных x и p .

Используя правило вычисления средних значений, получим:

$$(\delta x)^2 = \langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) x^2 \psi(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 |\psi(x)|^2 dx$$

и

$$(\delta p)^2 = \langle p^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \hat{p}^2 \psi(x) dx = -\hbar^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} dx.$$

Преобразуем интеграл в левой части неравенства (5.36):

* Это неравенство, действительно, очевидно, поскольку квадрат модуля любой функции неотрицателен, а интеграл от неотрицательной функции по любому отрезку неотрицателен.

$$\begin{aligned}
 \int_{-\infty}^{+\infty} \left| \alpha x \psi(x) + \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} \right|^2 dx &= \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\alpha x \psi(x) + \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} \right)^* \left(\alpha x \psi(x) + \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} \right) dx = \\
 &= \alpha^2 \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 |\psi|^2 dx + \alpha \int_{-\infty}^{+\infty} x \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right) dx + \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial x} dx.
 \end{aligned}$$

Таким образом, интеграл в (5.36) разбивается на три. Первый интеграл равен $(\delta x)^2$.

Второй интеграл преобразуется к виду*:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} x \frac{\partial |\psi|^2}{\partial x} dx = x |\psi|^2 \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx = -1.$$

Соответственно последний интеграл равен

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial x} dx = \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} dx = \frac{(\delta p)^2}{\hbar^2}.$$

Здесь первое слагаемое равно нулю в силу квадратичной интегрируемости функций $\psi(x)$ и $\frac{\partial \psi(x)}{\partial x}$.

Таким образом, неравенство (5.36) преобразуется к виду:

$$f(\alpha) = \alpha^2 (\delta x)^2 - \alpha + \frac{(\delta p)^2}{\hbar^2} \geq 0,$$

где $f(\alpha)$ – квадратичная функция вещественного (по условию задачи) аргумента α . Поскольку коэффициент при α^2 положителен, неравенство $f(\alpha) \geq 0$ выполняется для любого вещественного α при условии:

$$1 - 4(\delta x)^2 \frac{(\delta p)^2}{\hbar^2} \leq 0.$$

* Здесь мы воспользовались условием нормировки функции $\psi(x)$ и условием её квадратичной интегрируемости, из которого следует, что при $x \rightarrow \pm\infty$ волновая функция $\psi(x)$ должна убывать быстрее, чем $1/x$.

Отсюда следует соотношение неопределенностей Гейзенберга: $\delta x \delta p \geq \frac{\hbar}{2}$. Впервые подобное доказательство соотношения неопределенностей было предложено Германом Вейлем.

Задача 5.2.12. Пусть в некоторый момент времени состояние частицы характеризуется волновой функцией (гауссов волновой пакет)

$$\psi(x) = \text{const} \cdot \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{4a^2}\right) e^{\frac{i}{\hbar} p_0 x}. \quad (5.37)$$

Найти: а) плотность вероятности обнаружения частицы $\rho(x)$ в окрестности точки x ; б) среднее значение \bar{x} и его дисперсию D_x ; в) среднее значение \bar{p} и его дисперсию D_p ; г) произведение среднеквадратичных отклонений $\delta x \delta p$; д) волновую функцию частицы в импульсном представлении $\psi(p)$ и плотность вероятности обнаружения частицы $\rho(p)$ с импульсом p .

Решение

Определим сначала неизвестную константу в (5.37) из условия нормировки. Поскольку волновая функция экспоненциально убывает при $x \rightarrow \pm\infty$, можно нормировать её на единицу:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx = |\text{const}|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2a^2}\right) dx = 1.$$

С помощью замены $\frac{x-x_0}{a\sqrt{2}} = y$ интеграл сводится к интегралу Пуассона:

$$1 = |\text{const}|^2 \cdot a\sqrt{2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-y^2} dy = |\text{const}|^2 \cdot a\sqrt{2\pi}.$$

Выбирая фазу нормировочной константы равной нулю, получим выражение для нормированной волновой функции:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{2\pi}}} \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{4a^2}\right) e^{\frac{i}{\hbar} p_0 x}. \quad (5.38)$$

Плотность вероятности обнаружения частицы в окрестности точки x равна

$$\rho(x) = \frac{1}{a\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2a^2}\right).$$

Это распределение Гаусса. Именно поэтому волновая функция (5.37) называется гауссовым волновым пакетом. Из вида распределения Гаусса можно сразу определить среднее значение и дисперсию координаты: $\bar{x} = x_0$ и $D_x = a^2$. Однако, в целях иллюстрации общего правила вычисления средних значений, рассмотрим более подробно вычисление этих величин.

Итак, согласно правилу вычисления средних значений:

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x) \hat{x} \Psi(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} x \rho(x) dx = \frac{1}{a\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} x \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2a^2}\right) dx.$$

Здесь мы воспользовались тем обстоятельством, что в координатном представлении оператор $\hat{x} = x$ коммутирует с любой функцией координаты x .

Для вычисления интеграла снова сделаем замену переменных:

$$\frac{x-x_0}{a\sqrt{2}} = y. \text{ Тогда}$$

$$\bar{x} = \frac{a\sqrt{2}}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} y e^{-y^2} dy + \frac{x_0}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-y^2} dy = x_0.$$

Здесь первый интеграл обращается в нуль, поскольку интегрируется нечетная функция в симметричных пределах.

Вычислим теперь среднее значение квадрата координаты:

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x) \hat{x}^2 \Psi(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \rho(x) dx = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} (x-x_0)^2 \rho(x) dx + 2x_0 \int_{-\infty}^{+\infty} x \rho(x) dx - x_0^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x) dx. \end{aligned}$$

Второй и третий интегралы равны x_0 и 1 соответственно. Первый

интеграл сводится к интегралу вида $\int_{-\infty}^{+\infty} y^2 e^{-y^2} dy$, который можно

вычислить с помощью дифференцирования по параметру:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} y^2 e^{-y^2} dy = -\frac{d}{d\alpha} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha y^2} dy \Big|_{\alpha=1} = -\frac{d}{d\alpha} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \Big|_{\alpha=1} = \frac{\sqrt{\pi}}{2}.$$

В результате получим

$$\langle x^2 \rangle = \frac{2a^2}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} y^2 e^{-y^2} dy + 2x_0 \cdot x_0 - x_0^2 \cdot 1 = a^2 + x_0^2,$$

откуда дисперсия координаты равна

$$D_x = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = a^2 + x_0^2 - x_0^2 = a^2. \quad (5.39)$$

Вычислим теперь среднее значений импульса:

$$\begin{aligned} \bar{p} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \hat{p}_x \psi(x) dx = -i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} dx = \\ &= -i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x) \left(\frac{i}{\hbar} p_0 - \frac{2(x-x_0)}{4a^2} \right) dx = \\ &= p_0 \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x) dx + \frac{i\hbar}{2a^2} \int_{-\infty}^{+\infty} (x-x_0) \rho(x) dx = p_0. \end{aligned}$$

Вычисление среднего значения квадрата импульса дает:

$$\begin{aligned} \langle p^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \hat{p}_x^2 \psi(x) dx = -\hbar^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} dx = \\ &= -\hbar^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x) \left(-\frac{p_0^2}{\hbar^2} - \frac{1}{2a^2} - \frac{ip_0}{\hbar} \frac{(x-x_0)}{a^2} + \frac{(x-x_0)^2}{4a^4} \right) dx = \\ &= \left(p_0^2 + \frac{\hbar^2}{2a^2} \right) \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x) dx + \frac{ip_0 \hbar}{a^2} \int_{-\infty}^{+\infty} (x-x_0) \rho(x) dx - \\ &\quad - \frac{\hbar^2}{4a^4} \int_{-\infty}^{+\infty} (x-x_0)^2 \rho(x) dx = p_0^2 + \frac{\hbar^2}{2a^2} + 0 - \frac{\hbar^2}{4a^2} = p_0^2 + \frac{\hbar^2}{4a^2}, \end{aligned}$$

откуда получаем выражение для дисперсии импульса:

$$D_p = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2 = p_0^2 + \frac{\hbar^2}{4a^2} - p_0^2 = \frac{\hbar^2}{4a^2}. \quad (5.40)$$

Используя (5.39) и (5.40), вычислим произведение среднеквадратичных отклонений координаты и импульса:

$$\delta x \delta p = \sqrt{D_x D_p} = \sqrt{a^2 \frac{\hbar^2}{4a^2}} = \frac{\hbar}{2}.$$

Мы видим, что гауссов волновой пакет минимизирует соотношение неопределенностей Гейзенберга.

Согласно результатам задачи 5.2.4, для нахождения волновой функции частицы в импульсном представлении необходимо вычислить следующий интеграл:

$$\Psi(p) = \langle p | \Psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle p | x \rangle \langle x | \Psi \rangle dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar} px} dx,$$

где вместо функции $\Psi(x)$ мы должны подставить гауссов волновой пакет (5.38). Таким образом, задача сводится к вычислению интеграла

$$\Psi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{2\pi}}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{4a^2} + \frac{i}{\hbar}(p_0-p)x\right] dx. \quad (5.41)$$

Для упрощения выкладок можно сделать замену переменных $\frac{x-x_0}{2a} = y$, после чего интеграл (5.41) приобретает вид:

$$\Psi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{2\pi}}} 2a \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[-y^2 + \frac{i}{\hbar}(p_0-p)(x_0+2ay)\right] dy.$$

Это обычный гауссов интеграл, который можно вычислить, выделяя в экспоненте полный квадрат:

$$\Psi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{2a}{\sqrt{a\sqrt{2\pi}}} \exp\left[\frac{i}{\hbar}(p_0-p)x_0 - \frac{a^2(p_0-p)^2}{\hbar^2}\right] \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[-\left(y - \frac{ia}{\hbar}(p_0-p)\right)^2\right] dy.$$

Последний множитель представляет собой интеграл Пуассона и равен $\sqrt{\pi}$. Производя алгебраические сокращения, окончательно получим:

$$\Psi(p) = \sqrt{\frac{2a}{\hbar\sqrt{2\pi}}} \exp\left(-\frac{a^2(p_0-p)^2}{\hbar^2}\right) e^{\frac{i}{\hbar}(p_0-p)x_0}. \quad (5.42)$$

Таким образом, волновая функция (5.42) представляет собой гауссов волновой пакет, движущийся в импульсном пространстве. А плотность вероятности обнаружения частицы с импульсом p равна

$$\rho(p) = \frac{2a}{\hbar\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{2a^2(p_0-p)^2}{\hbar^2}\right) \quad (5.43)$$

и, также как и $\rho(x)$, имеет вид распределения Гаусса. Обратим внимание, что по виду распределения Гаусса (5.43) можно сразу определить среднее значение импульса и его дисперсию: $\bar{p} = p_0$ и $D_p = \frac{\hbar^2}{4a^2}$. Естественно, что полученные таким образом значения совпадают с результатами прямых вычислений, проделанных выше.

Замечание. Используя плотность вероятности (5.43), можно вычислить среднее значение от любой функции $F(p)$:

$$\bar{F} = \int_{-\infty}^{+\infty} F(p)\rho(p)dp.$$

Убедиться в справедливости этого утверждения можно на примере функций $F_1(p) = p$ и $F_2(p) = p^2$.

Ответ: а) $\rho(x) = \frac{1}{a\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2a^2}\right)$; б) $\bar{x} = x_0$, $D_x = a^2$;

в) $\bar{p} = p_0$, $D_p = \frac{\hbar^2}{4a^2}$; г) $\delta x \delta p = \frac{\hbar}{2}$;

д) $\psi(p) = \sqrt{\frac{2a}{\hbar\sqrt{2\pi}}} \exp\left(-\frac{a^2(p_0-p)^2}{\hbar^2}\right) e^{\frac{i}{\hbar}(p_0-p)x_0}$,

$\rho(p) = \frac{2a}{\hbar\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{2a^2(p_0-p)^2}{\hbar^2}\right)$.

5.3. Короткие задачи

Задача 5.3.1. Волновая функция частицы в некоторый момент времени ($t = 0$) имеет вид суммы двух волн де Бройля:

$$\psi(x) = C_1 \exp\left(\frac{i}{\hbar} p_1 x\right) + C_2 \exp\left(\frac{i}{\hbar} p_2 x\right),$$

где C_1 и C_2 – вещественные коэффициенты. Найти расстояние Δx между двумя ближайшими наивероятнейшими положениями частицы и отношение вероятностей P_{\max}/P_{\min} обнаружения частицы на отрезке длиной $\delta x \ll \Delta x$.

Решение

Вычислим $|\psi(x)|^2 = \psi^* \psi$, учитывая, что коэффициенты C_1 и C_2 вещественны:

$$|\psi(x)|^2 = |C_1|^2 + |C_2|^2 + 2C_1C_2 \cos\left(\frac{(p_1 - p_2)x}{\hbar}\right).$$

Функция $|\psi(x)|^2$ не является плотностью вероятности, потому что она не может быть нормирована на единицу. Однако, $|\psi(x)|^2$ имеет вероятностную интерпретацию в том смысле, что вероятность обнаружения частицы на отрезке малой длины δx прямо пропорциональна $|\psi(x)|^2$: $P \sim |\psi(x)|^2 \delta x$. Поэтому расстояние Δx между двумя ближайшими наивероятнейшими положениями частицы равно расстоянию между соседними максимумами $|\psi(x)|^2$:

$$\Delta x = \frac{2\pi\hbar}{|p_1 - p_2|},$$

а отношение вероятностей P_{\max}/P_{\min} обнаружения частицы на отрезке длиной $\delta x \ll \Delta x$ равно

$$\frac{P_{\max}}{P_{\min}} = \frac{|\psi(x)|_{\max}^2}{|\psi(x)|_{\min}^2} = \frac{(C_1 + C_2)^2}{(C_1 - C_2)^2}.$$

Ответ: $\Delta x = \frac{2\pi\hbar}{|p_1 - p_2|}, \frac{P_{\max}}{P_{\min}} = \frac{(C_1 + C_2)^2}{(C_1 - C_2)^2}.$

Задача 5.3.2. Известно, что частица находится в состоянии, в котором можно одновременно точно измерить проекции импульса p_x , p_y и координату частицы z . Значения этих величин равны соответственно p_{x0} , p_{y0} и z_0 . Определить волновую функцию $\psi(x, y, z)$ частицы в этом состоянии.

Решение

Поскольку операторы \hat{p}_x , \hat{p}_y и \hat{z} попарно коммутируют (см. задачу 5.2.9), величины p_x , p_y и z могут быть точно измерены одновременно. Для этого необходимо, чтобы волновая функция

$\psi(x, y, z)$ была одновременно собственной функцией операторов \hat{p}_x , \hat{p}_y и \hat{z} . Поэтому $\psi(x, y, z)$ представляет собой произведение собственных функций вида (5.19) и (5.21), найденных в задаче 5.2.4:

$$\psi(x, y, z) = \frac{1}{2\pi\hbar} \exp\left[\frac{i}{\hbar}(p_{x0}x + p_{y0}y)\right] \delta(z - z_0).$$

Ответ:
$$\psi(x, y, z) = \frac{1}{2\pi\hbar} \exp\left[\frac{i}{\hbar}(p_{x0}x + p_{y0}y)\right] \delta(z - z_0).$$

Задача 5.3.3. Волновая функция частицы в сферических координатах в некоторый момент времени имеет вид:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \chi(r, \theta) \left(2ie^{i\varphi} - e^{2i\varphi} \right).$$

Какие значения проекции момента импульса L_z частицы могут быть измерены и с какой вероятностью? Чему равно среднее значение $\langle L_z \rangle$?

Решение

При фиксированных r и θ волновая функция $\psi(r, \theta, \varphi)$ представляет собой суперпозицию собственных функций (5.26) оператора \hat{L}_z , соответствующих собственным значениям $L_z = \hbar, 2\hbar$ (см. задачу 5.2.5). Амплитуды вероятности измерения этих значений L_z равны, соответственно $C_1 = 2ia$ и $C_2 = -a$, где константа a находится из условия нормировки

$$|C_1|^2 + |C_2|^2 = 4|a|^2 + |a|^2 = 5|a|^2 = 1.$$

Отсюда $|a|^2 = 1/5$, а вероятности измерения значений $L_z = \hbar, 2\hbar$ соответственно равны

$$P_1 = |C_1|^2 = 4|a|^2 = \frac{4}{5} \quad \text{и} \quad P_2 = |C_2|^2 = |a|^2 = \frac{1}{5}.$$

Среднее значение $\langle L_z \rangle$ равно

$$\langle L_z \rangle = \hbar \cdot \frac{4}{5} + 2\hbar \cdot \frac{1}{5} = \frac{6\hbar}{5}.$$

Ответ: $L_z = \hbar, 2\hbar$, $P_1 = \frac{4}{5}$, $P_2 = \frac{1}{5}$, $\langle L_z \rangle = \frac{6\hbar}{5}$.

Задача 5.3.4. Вычислить коммутатор $[\hat{p}_x, f(\hat{x})]$.

Решение

Вычислим коммутатор $[\hat{p}_x, f(\hat{x})] = \hat{p}_x f(\hat{x}) - f(\hat{x}) \hat{p}_x$ в координатном представлении. Для этого подействуем им на произвольную дифференцируемую функцию $\varphi(x)$:

$$[\hat{p}_x, f(\hat{x})]\varphi(x) = -i\hbar \left(\frac{d(f(x)\varphi(x))}{dx} - f(x) \frac{d\varphi(x)}{dx} \right) = -i\hbar \frac{df}{dx} \varphi(x).$$

Таким образом,

$$[\hat{p}_x, f(\hat{x})] = -i\hbar \left. \frac{df(x)}{dx} \right|_{x=\hat{x}}.$$

Ответ: $[\hat{p}_x, f(\hat{x})] = -i\hbar \left. \frac{df(x)}{dx} \right|_{x=\hat{x}}.$

5.4. Задачи для самостоятельного решения

Задача 5.4.1. Рассмотрим эксперимент по интерференции электронов на двух щелях, описанный в задаче 5.2.1. Что произойдет с интерференционной картиной, если: а) источник электронов S сдвинуть вверх на расстояние D ($L_3 \gg d$, $L_3 \gg D$); б) расстояние между щелями удвоить; в) первую щель сделать вдвое шире второй?

Ответ: а) Интерференционная картина сдвинется вниз на

расстояние $\Delta x = \frac{LD}{L_3}$; б) расстояние между

интерференционными максимумами уменьшится в 2 раза; в) вероятность P обнаружения частицы в точке P

будет равна $P \approx \frac{5|C|^2}{L^2} \left[1 + \frac{4}{5} \cos \left(\frac{p_0(L_2 - L_1)}{\hbar} \right) \right]$, т.е.

положение интерференционной картины не изменится, однако картина станет менее контрастной ($P_{\max}/P_{\min} = 9$).

Задача 5.4.2. Используя определение эрмитового оператора, доказать, что оператор кинетической энергии эрмитов.

Задача 5.4.3. Найти собственные значения и ненормированные собственные функции оператора $\hat{T}_x = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$. Всегда ли эти собственные функции совпадают с собственными функциями оператора \hat{p}_x ?

Ответ: $\psi(x) = C_1 \exp(ikx) + C_2 \exp(-ikx)$, где $k \geq 0$; $T = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$.

Если $C_1 = 0$ или $C_2 = 0$, $\psi(x)$ совпадает с собственной функцией оператора \hat{p}_x .

Задача 5.4.4. Пусть волновая функция частицы в сферических координатах в некоторый момент времени имеет вид:

a) $\psi(r, \theta, \varphi) = \chi(r, \theta) \sin \varphi$,

б) $\psi(r, \theta, \varphi) = \chi(r, \theta) \cos^3(2\varphi)$,

в) $\psi(r, \theta, \varphi) = \chi(r, \theta) (\cos \varphi + i n \sin \varphi)$, $n \in \mathbb{R}$.

Какие значения проекции момента импульса L_z частицы могут быть измерены, и с какой вероятностью? Чему равно среднее значение $\langle L_z \rangle$?

Ответ: a) $L_z = \hbar, -\hbar$, $P_1 = P_{-1} = \frac{1}{2}$, $\langle L_z \rangle = 0$;

б) $L_z = 6\hbar, 2\hbar, -2\hbar, -6\hbar$, $P_6 = P_{-6} = \frac{1}{20}$, $P_2 = P_{-2} = \frac{9}{20}$,

$\langle L_z \rangle = 0$; в) $L_z = \hbar, -\hbar$, $P_1 = \frac{(n+1)^2}{2(n^2+1)}$, $P_{-1} = \frac{(n-1)^2}{2(n^2+1)}$,

$\langle L_z \rangle = \frac{2n}{(n^2+1)} \hbar$.

Задача 5.4.5. Вычислить коммутатор операторов кинетической энергии \hat{T} и координаты \hat{x} .

Ответ: $[\hat{T}, \hat{x}] = -\frac{\hbar^2}{m} \frac{\partial}{\partial x}$.

Задача 5.4.6. Доказать коммутационные соотношения для операторов проекций момента импульса:

$$[\hat{L}_i, \hat{x}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{x}_k, \quad [\hat{L}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{p}_k, \quad [\hat{L}^2, \hat{L}_i] = 0.$$

Задача 5.4.7. Вычислить коммутатор оператора момента импульса \hat{L} и оператора кинетической энергии \hat{T} .

Ответ: $[\hat{L}, \hat{T}] = 0$.

Задача 5.4.8. Волновая функция частицы в некоторый момент времени имеет вид:

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{L}}, & x \in \left[-\frac{L}{2}, \frac{L}{2}\right] \\ 0, & x \in \left(-\infty, -\frac{L}{2}\right) \cup \left[\frac{L}{2}, \infty\right) \end{cases}.$$

Найти:

а) среднее значение координаты \bar{x} и его дисперсию D_x ;

б) волновую функцию частицы в импульсном представлении $\psi(p)$ в тот же момент времени;

в) среднее значение импульса \bar{p} и его дисперсию D_p .

Ответ: а) $\bar{x} = 0$, $D_x = \frac{L^2}{12}$; б) $\psi(p) = \sqrt{\frac{L}{2\pi\hbar}} \frac{\sin(pL/2\hbar)}{pL/2\hbar}$;

в) $\bar{p} = 0$, $D_p = \infty$.

Замечание. Произведение среднеквадратичных отклонений $\delta p \delta x = \sqrt{D_p D_x}$ равно бесконечности*. Хотя этот результат и не противоречит соотношению неопределенностей Гейзенберга ($\delta p \delta x \geq \hbar/2$), он может быть неудобен для решения задач. Если же в качестве неопределенности координаты выбрать $\Delta x = L$, а в качестве неопределенности импульса – расстояние между нулями волновой функции $\psi(p)$, т.е. $\Delta p = 4\pi\hbar/L$, то получится соотношение неопределенности в виде $\Delta p \Delta x = 4\pi\hbar$.

Задача 5.4.9. В основном состоянии атома водорода волновая

* С математической точки зрения это связано с разрывностью волновой функции $\psi(x)$ в точках $\pm L/2$.

функция электрона имеет вид:

$$\psi(r) = \text{const} \cdot \exp\left(-\frac{r}{a_B}\right),$$

где a_B – боровский радиус, r – расстояние между электроном и протоном. Найти:

- а) плотность вероятности обнаружения электрона $\rho(r)$;
- б) наиболее вероятное расстояние между электроном и протоном r^* ;
- в) среднее расстояние \bar{r} и его дисперсию D_r ;
- г) среднее значение кинетической \bar{T} и потенциальной \bar{U} энергий электрона;
- д) волновую функцию электрона в импульсном представлении $\psi(p)$ и плотность вероятности $\rho(p)$;
- е) наиболее вероятное значение модуля импульса p^* ;
- ж) среднее значение модуля импульса \bar{p} и его дисперсию D_p ;
- з) произведение среднеквадратичных отклонений $\delta p \delta r$.

Ответ: а) $\rho(r) = \frac{4}{a_B^3} r^2 \exp\left(-\frac{2r}{a_B}\right)$; б) $r^* = a_B$; в) $\bar{r} = \frac{3}{2} a_B$,

$$D_r = \frac{3}{4} a_B^2; г) \bar{T} = \frac{\hbar^2}{2ma_B^2}, \bar{U} = -\frac{\hbar^2}{ma_B^2};$$

$$д) \psi(p) = \frac{2^{3/2} a_B^{3/2} \hbar^{5/2}}{\pi(\hbar^2 + p^2 a_B^2)^2}, \rho(p) = \frac{32 a_B^3 \hbar^5 p^2}{\pi(\hbar^2 + p^2 a_B^2)^4};$$

$$е) p^* = \frac{\hbar}{a_B \sqrt{3}}; ж) \bar{p} = \frac{8\hbar}{3\pi a_B}, D_p = \frac{\hbar^2}{a_B^2} \left(1 - \frac{64}{9\pi^2}\right);$$

$$з) \delta p \delta r = \hbar \sqrt{\frac{3}{4} - \frac{16}{3\pi^2}} \approx 0,458 \cdot \hbar.$$

Замечание. Обратите внимание на то, что полученный в данной задаче результат $\delta p \delta r \approx 0,458 \cdot \hbar$ не противоречит доказанному в задаче 5.2.11 соотношению $\delta p_x \delta x \geq 0,5 \cdot \hbar$, поскольку здесь речь идет о произведении неопределенностей модулей, а не проекций радиус-вектора и импульса на одну и ту же ось.

ГЛАВА 6 УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

6.1. Теоретический материал

1. Нестационарное уравнение Шредингера. Волновая функция $\Psi(\mathbf{r}, t)$ нерелятивистской частицы массы m может быть найдена из уравнения

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(\mathbf{r}, t),$$

где \hat{H} – линейный оператор, называемый *гамильтонианом*. В данной главе будут рассмотрены только простейшие гамильтонианы вида

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\mathbf{r}, t),$$

где Δ – оператор Лапласа, а $U(\mathbf{r}, t)$ – потенциальная энергия частицы.

2. Стационарное уравнение Шредингера. Если потенциальная энергия частицы не зависит явно от времени $U(\mathbf{r}, t) \equiv U(\mathbf{r})$, то ее полная энергия E сохраняется, и волновая функция частицы имеет вид (см. задачу 5.2.7)

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} Et\right).$$

Волновая функция $\psi(\mathbf{r})$ не зависит от времени и может быть найдена из уравнения

$$\Delta \psi(\mathbf{r}) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(\mathbf{r})) \psi(\mathbf{r}) = 0,$$

которое называется *стационарным* уравнением Шредингера.

3. Свойства одномерного движения. Как правило, решение стационарного уравнения Шредингера путем разделения переменных удается свести к решению одномерных уравнений. Поэтому кратко перечислим основные свойства одномерного движения, которые пригодятся при решении задач:

- Волновые функции частиц непрерывны во всех точках вещественной оси:

$$\psi(x_0 + 0) = \psi(x_0 - 0).$$

- Если в точке x_0 потенциальная энергия $U(x)$ непрерывна или имеет разрыв первого рода, то первая производная волновой функции также непрерывна:

$$\psi'(x_0 + 0) = \psi'(x_0 - 0).$$
- Если движение частицы финитно (ограничено), т.е. $U(x \rightarrow \pm\infty) > E$, то энергия частицы принимает дискретные значения E_n . В этом случае говорят, что спектр энергий дискретен.
- Если движение инфинитно (не ограничено) в одну сторону, т.е. $U(x \rightarrow +\infty) < E$ или $U(x \rightarrow -\infty) < E$, или в обе стороны ($U(x \rightarrow \pm\infty) < E$), то энергия частицы принимает непрерывные значения. В этом случае говорят, что спектр энергий непрерывен.
- Уровни энергии двукратно вырождены, если движение инфинитно в обе стороны, или не вырождены, если движение финитно или инфинитно в одну сторону.
- *Осцилляционная теорема.* Волновая функция $\psi_{n+1}(x)$ дискретного спектра, соответствующая $(n+1)$ -му по величине собственному значению гамильтониана E_n , обращается в нуль при конечных значениях x ровно n раз. Если частица может находиться только на отрезке $[a, b]$, то все n корней лежат в интервале (a, b) .

4. Плотность потока вероятности. Рассмотрим конечную область пространства объемом V_0 , ограниченную поверхностью площадью S_0 . Тогда вероятность обнаружения частицы в этом объеме равна

$$P = \int_{V_0} |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 dV.$$

Из нестационарного уравнения Шредингера и теоремы Остроградского–Гаусса следует, что изменение вероятности P со временем равно

$$\frac{\partial P}{\partial t} = - \int_{S_0} \mathbf{j} d\mathbf{S},$$

где вектор

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{i\hbar}{2m} (\Psi(\mathbf{r}, t) \nabla \Psi^*(\mathbf{r}, t) - \Psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla \Psi(\mathbf{r}, t))$$

называется *плотностью потока вероятности*. Если частицы не могут рождаться или уничтожаться, как это обычно бывает в нерелятивистских теориях, то плотность потока вероятности $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ связана с плотностью вероятности $\rho(\mathbf{r}, t) = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ уравнением непрерывности:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j} = 0.$$

5. Коэффициенты отражения и прохождения. Рассмотрим движение частицы в одномерном случае. Пусть потенциальная энергия частицы $U(x)$ при $x \rightarrow \pm\infty$ стремится к предельным значениям $U_{+\infty}$ и $U_{-\infty}$, соответственно. Будем считать, что частица движется в положительном направлении оси x из минус бесконечности, причем её полная энергия $E > U_{-\infty}$, а потенциальная энергия изменяется только в конечной области пространства $|x| < x_0 < \infty$, которая называется *потенциальным барьером*. Тогда частица может либо пройти через потенциальный барьер в область $x \rightarrow +\infty$, либо отразиться от барьера и вернуться в область $x \rightarrow -\infty$. Т.е. можно говорить о «падающей», «отраженной» и «прошедшей» через барьер частице. В стационарном случае ($\partial \rho / \partial t = 0$) из уравнения непрерывности следует, что

$$|j_x^{\text{пад}}| = |j_x^{\text{отр}}| + |j_x^{\text{прош}}|,$$

где $j_x^{\text{пад}}$, $j_x^{\text{отр}}$ и $j_x^{\text{прош}}$ – проекции векторов плотности потока вероятности \mathbf{j} падающей, отраженной и прошедшей частицы на ось x , вычисленные при $x \rightarrow \pm\infty$.

Вероятность отражения частицы от барьера называется *коэффициентом отражения* и определяется как

$$R = \left| \frac{j_x^{\text{отр}}}{j_x^{\text{пад}}} \right|.$$

Вероятность прохождения частицы через барьер называется *коэффициентом прохождения** и определяется как

* Коэффициент прохождения в литературе часто называют коэффициентом пропускания.

$$T = \left| \frac{j_x^{\text{прош}}}{j_x^{\text{пад}}} \right|.$$

При этом для коэффициентов отражения и прохождения выполняется соотношение:

$$R + T = 1.$$

6.2. Задачи с решениями

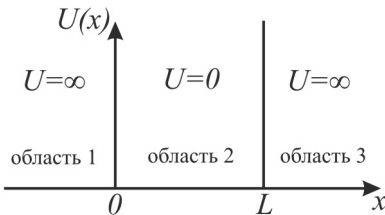


Рис. 6.1. Одномерная прямоугольная потенциальная яма.

Задача 6.2.1. Найти уровни энергии и волновые функции стационарных состояний нерелятивистской частицы массы m в прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками (рис. 6.1)

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x \in (0, L) \\ \infty, & x \in (-\infty, 0] \cup [L, \infty) \end{cases}.$$

Решение

Выделим на оси x три области, как показано на рис. 6.1: $x \in (-\infty, 0]$ (область 1), $x \in (0, L)$ (область 2) и $x \in [L, \infty)$ (область 3).

В каждой из этих областей уравнение Шредингера имеет очень простой вид

$$\psi'' + \frac{2m(E-U)}{\hbar^2} \psi = 0,$$

где $U = \text{const}$.

С классической точки зрения частица не может проникнуть в области 1 и 3 при любой энергии E . Вполне логично предположить, что эта ситуация реализуется и в квантовой теории, т.е. в областях 1 и 3 волновая функция должна быть равна нулю. Однако рассмотрим этот вопрос более формально, считая, что в области 1 потенциальная энергия частицы $U_0 = \text{const}$ велика, но конечна: $E < U_0 < \infty$. Тогда для этой области уравнение Шредингера будет иметь вид:

$$\psi'' - q^2 \psi = 0, \quad (6.1)$$

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

Общее решение уравнения (6.1) может быть представлено в виде:

$$\psi(x) = C_1 e^{qx} + C_2 e^{-qx},$$

где C_1 и C_2 – постоянные коэффициенты. Поскольку частица должна находиться вблизи потенциальной ямы (при конечных значениях x), волновая функция должна быть ограничена при $x \rightarrow -\infty$, т.е. $|\psi(x \rightarrow -\infty)| < \infty$, откуда следует, что $C_2 = 0$. Таким образом, в области 1 волновая функция частицы имеет вид $\psi(x) = C_1 e^{qx}$. Устремляя теперь потенциальную энергию частицы к бесконечности, получим:

$$U_0 \rightarrow \infty \Rightarrow q \rightarrow \infty \Rightarrow \psi(x < 0) \rightarrow 0.$$

Аналогично можно показать, что в области 3 волновая функция частицы также равна нулю. В результате

$$\psi_{1,3}(x) \equiv 0. \quad (6.2)$$

В области 2 уравнение Шредингера имеет вид:

$$\psi'' + k^2 \psi = 0, \quad (6.3)$$

где $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$. Общее решение этого уравнения запишем в виде:

$$\psi_2(x) = C_1 \sin(kx) + C_2 \cos(kx), \quad (6.4)$$

где C_1 и C_2 – постоянные коэффициенты.

Рассмотрим теперь граничные условия, накладываемые на волновую функцию. Из (6.2), (6.4) и условия непрерывности волновой функции в точке $x=0$ получим:

$$\psi_2(0) = \psi_1(0) = 0 \Rightarrow C_2 = 0 \Rightarrow \psi_2(x) = C_1 \sin(kx).$$

А из условия непрерывности в точке $x=L$:

$$\psi_2(L) = \psi_3(L) = 0 \Rightarrow \sin(kL) = 0. \quad (6.5)$$

Выполнение условия (6.5) возможно только при дискретных значениях k :

$$k_n = \frac{\pi n}{L}, \quad \text{где } n = 1, 2, 3, \dots$$

Таким образом, энергия частицы в стационарном состоянии может принимать только дискретные значения

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2, \quad \text{где } n = 1, 2, 3, \dots \quad (6.6)$$

а волновые функции частицы:

$$\Psi_{2,n}(x) = C_1 \sin\left(\frac{\pi x}{L} n\right).$$

Коэффициент C_1 теперь можно найти из условия нормировки:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x)|^2 dx = |C_1|^2 \int_0^L \sin^2\left(\frac{\pi n x}{L}\right) dx = 1 \Rightarrow C_1 = \sqrt{\frac{2}{L}} \cdot e^{i\alpha}.$$

Постоянный фазовый множитель волновой функции может быть выбран произвольно, поэтому здесь и далее будем выбирать фазовые множители таким образом, чтобы волновая функция имела наиболее простой вид. Так, если $\alpha = 0$, то волновые функции стационарных состояний частицы:

$$\Psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi x}{L} n\right), & x \in (0, L) \\ 0, & x \in (-\infty, 0] \cup [L, \infty) \end{cases}, \quad \text{где } n = 1, 2, 3, \dots \quad (6.7)$$

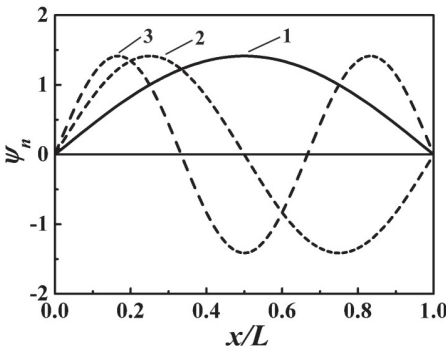


Рис. 6.2. Волновые функции ψ_1 (1), ψ_2 (2), ψ_3 (3) частицы.

Вид первых трех волновых функций $\Psi_{1,2,3}(x/L)$ показан на рис. 6.2.

Замечания.

1. Квантовое число n не может быть равно нулю, поскольку в этом случае волновая функция оказалась бы тождественно равной нулю на всей вещественной оси, что противоречит условию нормировки волновых функций.

2. При решении задачи не использовались условия непрерывности первой производной волновой функции, поскольку оно не выполняется в точках, в которых потенциальная энергия имеет разрыв второго рода. Однако во всех остальных точках, кроме $x = 0$ и $x = L$, первая производная волновой функции непрерывна.

3. Поскольку волновые функции стационарных состояний являются собственными функциями гамильтониана, а гамильтониан является эрмитовым оператором, то волновые функции ортогональны:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^*(x) \Psi_m(x) dx = \delta_{nm},$$

в чем можно убедиться, используя явный вид волновых функций (6.7).

4. На интервале $x \in (0, L)$ волновые функции $\Psi_n(x)$ имеют ровно $(n-1)$ нулей, что согласуется с осцилляционной теоремой.

5. Следует помнить, что полная (зависящая от времени) волновая функция частицы в стационарном состоянии равна произведению $\Psi_n(x)$ на экспоненциальный множитель $\exp(-iE_n t / \hbar)$. Например, в области $x \in (0, L)$ волновая функция частицы в прямоугольной потенциальной яме имеет вид:

$$\Psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi x}{L} n\right) \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right), \quad \text{где } E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2.$$

$$\text{Ответ: } E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2; \quad \Psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi x}{L} n\right) \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right); \\ n = 1, 2, 3, \dots$$

Задача 6.2.2. Нерелятивистская частица массы m находится в прямоугольной потенциальной яме ширины L с бесконечно высокими стенками (см. задачу 6.2.1). Известно, что частица находится в основном состоянии. Найти: а) среднее значение координаты \bar{x} и его дисперсию D_x ; б) среднее значение импульса \bar{p} и его дисперсию D_p ; в) произведение среднеквадратичных отклонений $\Delta x \Delta p$; г) волновую функцию частицы в импульсном представлении $\psi(p)$ и плотность вероятности $\rho(p)$.

Решение

Как следует из (6.7), волновая функция основного состояния частицы в прямоугольной потенциальной яме ширины L с бесконечно высокими стенками имеет следующий вид:

$$\psi(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right), & x \in (0, L) \\ 0, & x \in (-\infty, 0] \cup [L, \infty) \end{cases}. \quad (6.8)$$

С учетом (6.8) вычислим среднее значение координаты

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \hat{x} \psi dx = \frac{2}{L} \int_0^L x \sin^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) dx = \frac{1}{L} \int_0^L x dx - \frac{1}{L} \int_0^L x \cos\left(\frac{2\pi x}{L}\right) dx = \frac{L}{2}.$$

Чтобы убедиться в равенстве интеграла $\int_0^L x \cos\left(\frac{2\pi x}{L}\right) dx$ нулю,

достаточно один раз взять его по частям. Вычислим теперь среднее значение квадрата координаты:

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \hat{x}^2 \psi dx = \frac{2}{L} \int_0^L x^2 \sin^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) dx = \frac{1}{L} \int_0^L x^2 dx - \frac{1}{L} \int_0^L x^2 \cos\left(\frac{2\pi x}{L}\right) dx$$

Интеграл $\int_0^L x^2 \cos\left(\frac{2\pi x}{L}\right) dx$ вычисляется путем двукратного интегрирования по частям и равен $L^3/2\pi^2$. В результате,

$\langle x^2 \rangle = L^2 \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi^2} \right)$, откуда дисперсия координаты:

$$D_x = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = L^2 \left(\frac{1}{12} - \frac{1}{2\pi^2} \right). \quad (6.9)$$

Вычислим теперь среднее значение импульса частицы:

$$\bar{p} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \hat{p} \psi dx = -\frac{2i\hbar}{L} \int_0^L \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \frac{d}{dx} \left[\sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \right] dx = 0.$$

Данный результат очевиден. Действительно, если частица находится в бесконечно глубокой потенциальной яме, то она из нее выйти не может, поэтому её средний импульс равен нулю. Однако среднее значение квадрата импульса отлично от нуля:

$$\langle p^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \hat{p}^2 \psi dx = -\frac{2\hbar^2}{L} \int_0^L \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \frac{d^2}{dx^2} \left[\sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \right] dx = \frac{\pi^2 \hbar^2}{L^2}.$$

Дисперсия импульса:

$$D_p = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{L^2}. \quad (6.10)$$

Произведение среднеквадратичных отклонений координаты (6.9) и импульса (6.10) удовлетворяет неравенству:

$$\delta x \delta p = \sqrt{D_x D_p} = \hbar \sqrt{\frac{\pi^2}{12} - \frac{1}{2}} \approx 0,57\hbar > \frac{\hbar}{2}.$$

Таким образом, еще раз подтверждается справедливость соотношения неопределенностей Гейзенберга.

Переход к волновой функции в импульсном представлении осуществляется стандартным образом (см. **Главу 5**):

$$\begin{aligned} \Psi(p) &= \langle p | \Psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle p | x \rangle \langle x | \Psi \rangle dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_p^*(x) \Psi(x) dx = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \sqrt{\frac{2}{L}} \int_0^L \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \exp\left(-\frac{ipx}{\hbar}\right) dx = \\ &= \frac{1}{2i\sqrt{\pi L \hbar}} \left\{ \int_0^L \exp\left[i\left(\frac{\pi}{L} - \frac{p}{\hbar}\right)x\right] dx - \int_0^L \exp\left[i\left(-\frac{\pi}{L} - \frac{p}{\hbar}\right)x\right] dx \right\}. \quad (6.11) \end{aligned}$$

Входящие в выражение (6.11) интегралы равны

$$\int_0^L e^{i\alpha x} dx = \frac{1}{i\alpha} e^{i\alpha x} \Big|_0^L = \frac{e^{i\alpha L} - 1}{i\alpha}.$$

В результате,

$$\Psi(p) = -\frac{1}{2\sqrt{\pi L \hbar}} \left\{ \frac{\exp\left[i\left(\frac{\pi}{L} - \frac{p}{\hbar}\right)L\right] - 1}{\left(\frac{\pi}{L} - \frac{p}{\hbar}\right)} + \frac{\exp\left[-i\left(\frac{\pi}{L} + \frac{p}{\hbar}\right)L\right] - 1}{\left(\frac{\pi}{L} + \frac{p}{\hbar}\right)} \right\}.$$

Наконец, после простых алгебраических преобразований находим:

$$\Psi(p) = \frac{2\hbar\sqrt{\pi L \hbar}}{(\pi^2 \hbar^2 - p^2 L^2)} \cos\left(\frac{pL}{2\hbar}\right) \exp\left(-i\frac{pL}{2\hbar}\right). \quad (6.12)$$

Плотность вероятности обнаружения частицы с импульсом p равна

$$\rho(p) = |\psi(p)|^2 = \frac{4\pi\hbar^3 L}{(\pi^2\hbar^2 - p^2 L^2)^2} \cos^2\left(\frac{pL}{2\hbar}\right).$$

Замечание. Волновая функция (6.12) непрерывна на всей вещественной оси $p \in (-\infty, \infty)$, поскольку предел

$$\lim_{p \rightarrow \pm \frac{\pi\hbar}{L}} \frac{\cos\left(\frac{pL}{2\hbar}\right)}{\pi^2\hbar^2 - p^2 L^2} = \frac{1}{4\pi\hbar^2}$$

имеет конечное значение.

Ответ: а) $\bar{x} = \frac{L}{2}$, $D_x = L^2 \left(\frac{1}{12} - \frac{1}{2\pi^2} \right)$; б) $\bar{p} = 0$, $D_p = \frac{\pi^2\hbar^2}{L^2}$;

в) $\delta x \delta p = \hbar \sqrt{\frac{\pi^2}{12} - \frac{1}{2}}$;

г) $\psi(p) = \frac{2\hbar\sqrt{\pi L\hbar}}{(\pi^2\hbar^2 - p^2 L^2)} \cos\left(\frac{pL}{2\hbar}\right) \exp\left(-i\frac{pL}{2\hbar}\right)$,

$$\rho(p) = \frac{4\pi\hbar^3 L}{(\pi^2\hbar^2 - p^2 L^2)^2} \cos^2\left(\frac{pL}{2\hbar}\right).$$

Задача 6.2.3. Нерелятивистская частица массы m находится в прямоугольной потенциальной яме ширины L с бесконечно высокими стенками. Известно, что частица находится в нестационарном состоянии, описываемом волновой функцией

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_1(x) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_1 t\right) + \frac{i}{\sqrt{2}} \psi_2(x) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_2 t\right),$$

где $\psi_1(x)$ и $\psi_2(x)$ – волновые функции стационарных состояний, найденные в задаче 6.2.1, а E_1 и E_2 – энергии частицы в этих состояниях. Найти средние значения энергии \bar{E} и координаты \bar{x} частицы.

Решение

Волновые функции основного $\psi_1(x)$ и первого возбужденного $\psi_2(x)$ состояний частицы в прямоугольной потенциальной яме ширины L с бесконечно высокими стенками имеют вид (6.7):

$$\Psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi x}{L} n\right), & x \in (0, L) \\ 0, & x \in (-\infty, 0] \cup [L, \infty) \end{cases}$$

где $n = 1, 2$.

Согласно условию задачи частица может быть обнаружена либо в первом, либо во втором стационарном состоянии с амплитудами вероятности

$$C_1(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_1 t\right) \quad \text{и} \quad C_2(t) = \frac{i}{\sqrt{2}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_2 t\right).$$

Поэтому средняя энергия частицы равна

$$\bar{E} = |C_1|^2 E_1 + |C_2|^2 E_2 = \frac{E_1 + E_2}{2}.$$

Вычислим среднее значение координаты частицы в нестационарном состоянии, описываемом волновой функцией $\Psi(x, t)$:

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \hat{x} \Psi dx = \frac{1}{2} \int_0^L x \Psi_1^2 dx + \frac{1}{2} \int_0^L x \Psi_2^2 dx + \sin\left(\frac{E_2 - E_1}{\hbar} t\right) \int_0^L x \Psi_1 \Psi_2 dx.$$

Два первых интеграла вычисляются так же, как в задаче 6.2.2:

$$\int_0^L x \Psi_1^2 dx = \int_0^L x \Psi_2^2 dx = \frac{L}{2},$$

а последний интеграл равен

$$\begin{aligned} \int_0^L x \Psi_1 \Psi_2 dx &= \frac{2}{L} \int_0^L x \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right) dx = \frac{4}{L} \int_0^L x \sin^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) \cos\left(\frac{\pi x}{L}\right) dx = \\ &= -\frac{4}{3\pi} \int_0^L \sin^3\left(\frac{\pi x}{L}\right) dx = \frac{4L}{3\pi^2} \left[\cos\left(\frac{\pi x}{L}\right) \Big|_0^L - \frac{1}{3} \cos^3\left(\frac{\pi x}{L}\right) \Big|_0^L \right] = -\frac{16L}{9\pi^2}. \end{aligned}$$

В результате получаем:

$$\bar{x}(t) = L \left[\frac{1}{2} - \frac{16}{9\pi^2} \sin\left(\frac{E_2 - E_1}{\hbar} t\right) \right].$$

Таким образом, частица, находящаяся в нестационарном состоянии $\Psi(x, t)$, совершает гармонические колебания относительно середины потенциальной ямы с частотой $\omega = (E_2 - E_1)/\hbar$ и амплитудой $16L/9\pi^2$.

$$\text{Ответ: } \bar{E} = \frac{E_1 + E_2}{2}; \quad \bar{x}(t) = L \left[\frac{1}{2} - \frac{16}{9\pi^2} \sin\left(\frac{E_2 - E_1}{\hbar} t\right) \right].$$

Задача 6.2.4. Найти дискретные уровни энергии стационарных состояний нерелятивистской частицы массы m в прямоугольной потенциальной яме со стенками конечной высоты

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x \in (0, L) \\ U_0, & x \in (-\infty, 0] \cup [L, \infty) \end{cases}.$$

Решение

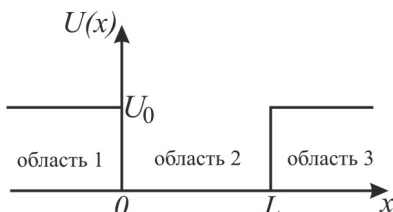


Рис. 6.3. Прямоугольная потенциальная яма со стенками конечной высоты.

Данная задача похожа на **задачу 6.2.1**. Однако существуют два обстоятельства, отличающие решение данной задачи от решения **задачи 6.2.1**.

Во-первых, поскольку по условию задачи необходимо определить дискретный спектр собственных значений гамильтониана, будем считать, что

энергия частицы лежит в интервале $0 < E < U_0$.

Во-вторых, поскольку в точках $x=0$ и $x=L$ потенциальная энергия имеет разрывы первого рода, то её первая производная по x должна быть непрерывна в этих точках.

Как и в **задаче 6.2.1**; разобьем ось x на три области (см. рис. 6.3). В областях 1 и 3 уравнение Шредингера имеет вид

$$\psi'' - q^2 \psi = 0, \quad \text{где } q = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}.$$

Его общее решение

$$\psi_{1,3}(x) = C_1 e^{qx} + C_3 e^{-qx},$$

где C_1 и C_3 – постоянные коэффициенты. Поскольку при $x \rightarrow \pm\infty$ волновая функция должна быть ограничена $|\psi(x \rightarrow \pm\infty)| < \infty$, получаем:

$$\psi_1(x) = C_1 e^{qx} \quad \text{и} \quad \psi_3(x) = C_3 e^{-qx}. \quad (6.13)$$

В области 2 уравнение Шредингера имеет вид

$$\psi'' + k^2\psi = 0,$$

где $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$. Его общее решение удобнее записать в виде:

$$\psi_2(x) = C_2 \sin(kx + \delta), \quad (6.14)$$

где C_2 и δ – постоянные коэффициенты.

Запишем теперь граничные условия, налагаемые на волновую функцию в точках $x = 0$ и $x = L$. Тогда из (6.13) и (6.14) следует:

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) \Rightarrow C_1 = C_2 \sin \delta, \quad (6.15a)$$

$$\psi_2(L) = \psi_3(L) \Rightarrow C_3 e^{-qL} = C_2 \sin(kL + \delta), \quad (6.15б)$$

$$\psi'_1(0) = \psi'_2(0) \Rightarrow qC_1 = kC_2 \cos \delta, \quad (6.15в)$$

$$\psi'_2(L) = \psi'_3(L) \Rightarrow -qC_3 e^{-qL} = kC_2 \cos(kL + \delta). \quad (6.15г)$$

В уравнениях (6.15а) – (6.15г) содержится пять неизвестных величин C_1 , C_2 , C_3 , δ и E . Чтобы определить их все необходимо дополнительно использовать условие нормировки волновой функции. Определим энергии стационарных состояний*. Для этого поделим уравнение (6.15в) на (6.15а) и (6.15г) на (6.15б) и получим систему из двух уравнений:

$$q = k \cdot \operatorname{ctg} \delta \quad \text{и} \quad q = -k \cdot \operatorname{ctg}(kL + \delta). \quad (6.16)$$

Отметим, что $kL = \pi n$, где n – целое число, не является решением системы уравнений (6.16). Считая для определенности, что $\delta \in \left[0, \frac{\pi}{2}\right]$, выражая q через k и U_0 и используя известные формулы тригонометрии, преобразуем систему уравнений (6.16) к виду:

$$\sin \delta = \frac{\hbar k}{\sqrt{2mU_0}} \quad \text{и} \quad \sin(kL + \delta) = \pm \frac{\hbar k}{\sqrt{2mU_0}}. \quad (6.17)$$

При этом преобразовании добавилось лишнее решение $kL = \pi n$, которое, как уже отмечалось, не является решением системы уравнений (6.16) и должно быть отброшено. Исключая из (6.17) константу δ , получим трансцендентное уравнение:

* Коэффициенты C_1 , C_2 , C_3 и δ вычислите самостоятельно.

$$\arcsin\left(\frac{\hbar k}{\sqrt{2mU_0}}\right) = \frac{\pi n - kL}{2}, \quad \text{где} \quad \frac{\pi n - kL}{2} = \delta \in \left[0, \frac{\pi}{2}\right]. \quad (6.18)$$

Рассмотрим графическое решение уравнения (6.18). Для этого введем следующие обозначения:

$$\xi = \frac{kL}{2} \quad \text{и} \quad \gamma = \frac{\hbar}{L} \sqrt{\frac{2}{mU_0}}.$$

Тогда уравнение (6.18) принимает вид:

$$\arcsin(\gamma\xi) = \frac{\pi n}{2} - \xi, \quad \text{где} \quad \frac{\pi(n-1)}{2} \leq \xi \leq \frac{\pi n}{2}.$$

Рассмотрим два случая.

Случай А. $n = 2m - 1$, где $m = 1, 2, 3, \dots$ Тогда

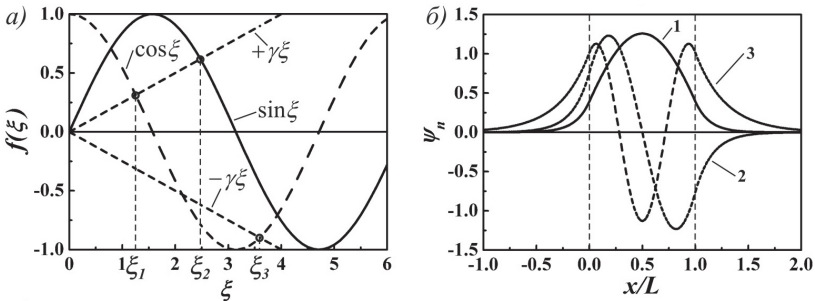


Рис. 6.4. а) Графическое решение уравнений (6.19) и (6.20) при $\gamma = 1/4$; б) волновые функции стационарных состояний ψ_1 (1), ψ_2 (2), ψ_3 (3) частицы.

$$\cos \xi = \pm \gamma \xi, \quad \text{где} \quad \xi \in \left[0, \frac{\pi}{2}\right] \cup \left[\pi, \frac{3\pi}{2}\right] \cup \dots \quad (6.19)$$

Графическое решение уравнения (6.19) приведено на рис. 6.4 а; ξ_n – корни уравнения. Обратим внимание, что, во-первых, число корней конечно; во-вторых, уравнение всегда имеет хотя бы один корень.

Случай Б. $n = 2m$, где $m = 1, 2, 3, \dots$ Тогда

$$\sin \xi = \pm \gamma \xi, \quad \text{где} \quad \xi \in \left[\frac{\pi}{2}, \pi\right] \cup \left[\frac{3\pi}{2}, 2\pi\right] \cup \dots \quad (6.20)$$

Графическое решение уравнения (6.20) приведено на рис. 6.4 а; ξ_n – корни уравнения. В отличие от (6.19), уравнение (6.20) может не иметь ни одного решения (если $\gamma\pi/2 > 1$).

После определения (графически или численно) чисел ξ_n , энергии стационарных состояний частицы вычисляются по формуле:

$$E_n = \frac{2\hbar^2 \xi_n^2}{mL^2}, \quad \text{где } n=1, 2, 3, \dots, n_{\max} < \infty.$$

Таким образом, в яме конечной глубины уровни энергии сдвигаются вниз по сравнению с уровнями энергии в бесконечно глубокой яме, т.к. $\xi_n < \pi n / 2$; при этом их число оказывается конечным. Кроме того, у частицы в симметричной яме всегда имеется хотя бы один уровень энергии. При этом волновая функция частицы в областях 1 и 3 отлична от нуля (см. рис. 6.4 б). Это означает, что существует ненулевая вероятность обнаружения частицы в классически запрещенной области.

Рассмотрим два предельных случая.

1. Бесконечно глубокая яма ($U_0 \rightarrow \infty \Rightarrow \gamma \rightarrow 0$)

$$\xi_n \rightarrow \frac{\pi n}{2} \Rightarrow E_n = \frac{2\hbar^2 \xi_n^2}{mL^2} \rightarrow \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2,$$

что совпадает с формулой (6.6).

2. «Мелкая» яма, т.е. ямы для которой выполняется условие:

$$\gamma \gg 1 \Leftrightarrow U_0 \ll \frac{2\hbar^2}{mL^2}.$$

В этом случае имеется один уровень энергии, положение которого можно найти методом последовательных приближений из уравнения (6.19). В нулевом приближении получаем уравнение:

$$\gamma \xi = 1, \quad \text{откуда } \xi = \frac{1}{\gamma}.$$

В первом приближении –

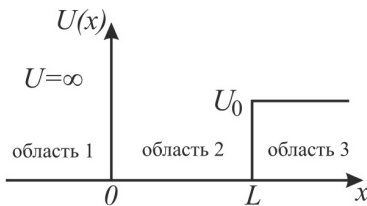
$$\gamma \xi = \cos\left(\frac{1}{\gamma}\right) \approx 1 - \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\gamma}\right)^2, \quad \text{откуда } \xi \approx \frac{1}{\gamma} - \frac{1}{2\gamma^3}. \quad (6.21)$$

Из (6.21) находим положение единственного уровня энергии:

$$E \approx U_0 \left(1 - \frac{mL^2}{2\hbar^2} U_0 \right).$$

Ответ: $E_n = \frac{2\hbar^2 \xi_n^2}{mL^2}$, $n = 1, 2, 3, \dots, n_{\max} < \infty$; в случае «мелкой» ямы частица имеет один уровень энергии $E \approx U_0 \left(1 - \frac{mL^2}{2\hbar^2} U_0 \right)$.

Задача 6.2.5. Найти уровни энергии стационарных состояний нерелятивистской частицы массы m в прямоугольной потенциальной яме с одной бесконечно высокой стенкой*



$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x \in (-\infty, 0] \\ 0, & x \in (0, L) \\ U_0, & x \in [L, \infty) \end{cases}.$$

Решение

Рис. 6.5. Прямоугольная потенциальная яма с одной стенкой конечной высоты.

Для определения дискретных уровней энергии связанных состояний частицы будем считать, что $0 < E < U_0$. Решая уравнение

Шредингера в областях 1, 2 и 3 (см. рис. 6.5), получим:

$$\psi_1(x) \equiv 0, \quad x \in (-\infty, 0], \quad (6.22a)$$

$$\psi_2(x) = C_2 \sin(kx + \delta), \quad x \in (0, L), \quad (6.22б)$$

$$\psi_3(x) = C_3 e^{-qx}, \quad x \in [L, \infty), \quad (6.22в)$$

где $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ и $q = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}$. Из (6.22a), (6.22б) и условия непрерывности волновой функции в точке $x = 0$ следует:

$$\psi_2(0) = \psi_1(0) = 0 \Rightarrow \delta = 0 \Rightarrow \psi_2(x) = C_2 \sin(kx), \quad (6.23)$$

а из (6.22б), (6.22в) и условий непрерывности волновой функции и её первой производной в точке $x = L$ с учетом (6.23) получаем:

$$\psi_2(L) = \psi_3(L) \Rightarrow C_2 \sin(kL) = C_3 e^{-qL}, \quad (6.24a)$$

* Данная задача очень похожа на задачу 6.2.4, и энергии стационарных состояний можно было бы выразить непосредственно из полученного в задаче 6.2.4 выражения для E_n .

$$\psi'_2(L) = \psi'_3(L) \Rightarrow kC_2 \cos(kL) = -qC_3 e^{-qL}. \quad (6.24б)$$

Разделим уравнение (6.24б) на (6.24а) и, выражая q через k , получим уравнение

$$-\xi \operatorname{ctg}(\xi) = \sqrt{R^2 - \xi^2}, \quad (6.25)$$

где $\xi = kL$ и $R = \frac{L\sqrt{2mU_0}}{\hbar}$.

Это уравнение (6.25) можно свести к $\sin \xi = \pm \xi/R$ (как это делалось в задаче 6.2.4), а можно решить графически, найдя точки пересечения ξ_n функции $y(\xi) = -\xi \operatorname{ctg}(\xi)$ и окружности радиуса R с центром в начале координат. Последний вариант решения показан на рис. 6.6а. Из рисунка видно, что частица может не иметь ни одного стационарного уровня энергии в дискретном спектре, а условием существования n -го связанного состояния

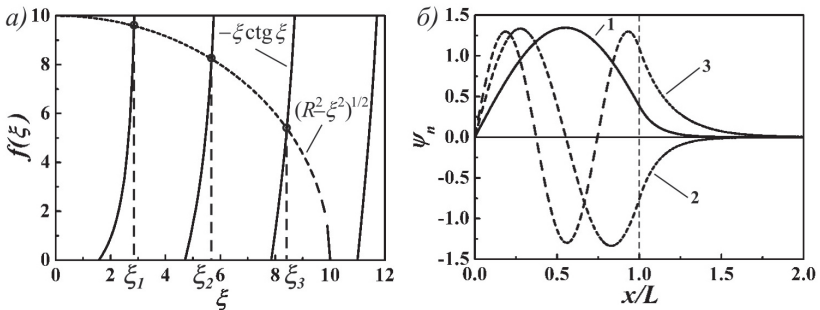


Рис. 6.6. а) Графическое решение уравнения (6.25) при $R=10$; б) волновые функции стационарных состояний ψ_1 (1), ψ_2 (2), ψ_3 (3) частицы.

является неравенство

$$\frac{2mU_0L^2}{\hbar^2} \geq \frac{\pi^2}{4} (2n-1)^2.$$

В результате, энергии дискретных стационарных состояний частицы (если они существуют) будут равны

$$E_n = \frac{\hbar^2 \xi_n^2}{2mL^2}.$$

Волновые функции стационарных состояний при $R=10$ показаны на рис. 6.6б.

Ответ: $E_n = \frac{\hbar^2 \xi_n^2}{2mL^2}$, $n = 1, 2, 3, \dots, n_{\max} < \infty$; частица может не иметь ни одного уровня энергии.

Задача 6.2.6. Найти уровни энергии гармонического осциллятора, используя приближенный метод Вентцеля–Крамерса–Бриллюэна (ВКБ).

Решение

Согласно методу ВКБ, уровни энергии стационарных состояний находятся из условия:

$$\int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(E_n - U(x))} dx = \left(n + \frac{1}{2}\right) \pi \hbar, \quad n \gg 1,$$

где $x_{1,2}$ – классические точки поворота. Потенциальная энергия гармонического осциллятора равна

$$U(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2},$$

где m – масса частицы, а ω – частота её колебаний.

Определим классические точки поворота частицы:

$$E_n = \frac{m\omega^2 x^2}{2} \Rightarrow x_{1,2} = \pm \frac{1}{\omega} \sqrt{\frac{2E_n}{m}}$$

и вычислим интеграл

$$I = \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(E_n - U(x))} dx = 2 \int_0^{x_2} \sqrt{2mE_n - m^2 \omega^2 x^2} dx = 2m\omega \int_0^{x_2} \sqrt{x_2^2 - x^2} dx.$$

После замены переменных $x = x_2 \sin \theta$ получаем:

$$I = \frac{\pi}{2} m\omega x_2^2 = \frac{\pi E_n}{\omega}.$$

В результате,

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

Замечание. В методе ВКБ целое число n много больше единицы. Однако в случае гармонического осциллятора метод ВКБ даёт точные значения уровней энергии при любых значениях квантового числа n .

Ответ: $E_n = \hbar\omega\left(\frac{1}{2} + n\right)$, $n = 0, 1, 2, 3, \dots, \infty$.

Задача 6.2.7. Найти энергию и волновую функцию основного состояния гармонического осциллятора, решая уравнение Шредингера.

Решение

Потенциальная энергия гармонического осциллятора равна

$$U(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2},$$

где m – масса частицы, а ω – частота её колебаний.

Для гармонического осциллятора уравнение Шредингера имеет вид:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{m\omega^2 x^2}{2}\right)\psi(x) = 0.$$

Делая замену переменных $\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$, преобразуем уравнение

Шредингера к виду

$$\psi''(\xi) + \left(\frac{2E}{\hbar\omega} - \xi^2\right)\psi(\xi) = 0, \quad (6.26)$$

где штрихи обозначают дифференцирование по ξ .

Следует отметить, что уравнение (6.26) не относится к классу дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами (как это было в задачах 6.2.1, 6.2.4 и 6.2.5).

Для решения уравнения (6.26) найдем сначала его асимптотическое решение $\psi_{ass}(\xi)$ при $\xi \rightarrow \pm\infty$. В уравнении (6.26) можно пренебречь $2E/\hbar\omega$ по сравнению с ξ^2 , тогда

$$\psi''_{ass}(\xi) = \xi^2\psi_{ass}(\xi). \quad (6.27)$$

Асимптотическим решением уравнения (6.27) является функция

$$\psi_{ass}(\xi) = e^{-\xi^2/2}. \quad (6.28)$$

Действительно,

$$\psi'_{ass}(\xi) = -\xi e^{-\xi^2/2} \quad \text{и} \quad \psi''_{ass}(\xi) = \xi^2 e^{-\xi^2/2} - e^{-\xi^2/2} \rightarrow \xi^2 e^{-\xi^2/2}.$$

Зная асимптотическое решение (6.28), ищем точное решение уравнения (6.26) в виде:

$$\psi(\xi) = \chi(\xi)e^{-\xi^2/2}. \quad (6.29)$$

Подставляя (6.29) в уравнение (6.26), получим дифференциальное уравнение

$$\chi'' - 2\xi\chi' + 2n\chi = 0, \quad (6.30)$$

где $2n = \frac{2E}{\hbar\omega} - 1$.

Поскольку волновая функция частицы должна быть ограниченной при $\xi \rightarrow \pm\infty$, функции $\chi(\xi)$ не должны расти быстрее, чем $\exp(\xi^2/2)$. Оказывается, что функции $\chi(\xi)$ удовлетворяют этому условию тогда и только тогда, когда $n = 0, 1, 2, 3, \dots$, при этом функции $\chi_n(\xi)$ являются полиномами n -го порядка, называемыми полиномами Эрмита. Отметим, что полином Эрмита n -го порядка имеет ровно n вещественных нулей.

Остановимся более подробно на основном состоянии гармонического осциллятора. Согласно осцилляционной теореме, волновая функция основного состояния не имеет нулей на всей вещественной оси. Это означает, что функция $\chi_0(\xi)$ должна быть полиномом 0-го порядка, т.е. $\chi_0(\xi) = a_0 = \text{const}$. Подставляя $\chi_0(\xi)$ в уравнение (6.30) найдем энергию основного состояния гармонического осциллятора:

$$\left(\frac{2E_0}{\hbar\omega} - 1\right)a_0 = 0 \Rightarrow E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}.$$

Волновая функция основного состояния имеет вид:

$$\Psi_0(\xi) = a_0 e^{-\xi^2/2}.$$

Константу a_0 найдем из условия нормировки:

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi_0(x)|^2 dx = a_0^2 \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} d\xi = a_0^2 \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}} \Rightarrow a_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}.$$

Окончательно волновую функцию основного состояния гармонического осциллятора запишем в виде

$$\Psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right].$$

Замечание. Плотность вероятности обнаружить частицу в основном состоянии равна

$$\rho(x) = |\Psi_0(x)|^2 = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \exp\left[-\frac{m\omega}{\hbar}x^2\right],$$

т.е. описывается функцией Гаусса со средним значением $\bar{x} = 0$ и дисперсией $\sigma^2 = \hbar/(2m\omega)$.

Ответ: $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$, $\Psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right]$.

Задача 6.2.8. Найти уровни энергии и волновые функции связанных стационарных состояний нерелятивистской частицы массы m , если её потенциальная энергия $U(x) = A\delta(x)$, где $A = \text{const} < 0$.

Решение

Чтобы найти энергии связанных стационарных состояний, положим $E = -|E|$. Тогда стационарное уравнение Шредингера запишется в виде:

$$\Psi'' + \frac{2m|A|}{\hbar^2}\delta(x)\Psi - \frac{2m|E|}{\hbar^2}\Psi = 0. \quad (6.31)$$

Перепишем уравнение (6.31), введя обозначения $k = \frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar}$ и

$$q = \frac{m|A|}{\hbar^2}:$$

$$\Psi'' + 2q\delta(x)\Psi - k^2\Psi = 0. \quad (6.32)$$

Разобьем интервал $x \in (-\infty, \infty)$ на три области: $(-\infty, -\varepsilon)$, $(-\varepsilon, \varepsilon)$ и (ε, ∞) . В первой и третьей областях δ -функция равна нулю, и уравнение (6.32) имеет вид:

$$\Psi'' - k^2\Psi = 0. \quad (6.33)$$

Общее решение уравнения (6.33):

$$\Psi(x) = C_1 e^{kx} + C_2 e^{-kx},$$

где C_1 и C_2 – произвольные константы. Учитывая, что при $x \rightarrow \pm\infty$ волновая функция должна быть ограничена $|\Psi(x \rightarrow \pm\infty)| < \infty$, получим

$$\psi_1(x) = C_1 e^{kx}, \text{ при } x < -\varepsilon, \quad (6.34a)$$

$$\psi_3(x) = C_3 e^{-kx}, \text{ при } x > \varepsilon. \quad (6.34б)$$

Рассмотрим теперь граничные условия, накладываемые на волновую функцию. Во-первых, волновая функция должна быть непрерывна в точке $x = 0$. Устремляя ε к нулю, получим:

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) = \psi_3(0),$$

откуда, с учетом (6.34a) и (6.34б),

$$C_1 = C_3 \equiv C \quad \text{и} \quad \psi_2(0) = C. \quad (6.35)$$

Кроме того, волновая функция должна иметь непрерывную первую производную в точках $x = \pm\varepsilon$:

$$\left. \frac{d\psi_1}{dx} \right|_{x=-\varepsilon} = Cke^{-k\varepsilon} = \left. \frac{d\psi_2}{dx} \right|_{x=-\varepsilon} \quad \text{и} \quad \left. \frac{d\psi_3}{dx} \right|_{x=\varepsilon} = -Cke^{-k\varepsilon} = \left. \frac{d\psi_2}{dx} \right|_{x=\varepsilon}. \quad (6.36)$$

Рассмотрим теперь уравнение Шредингера (6.32) в области $x < |\varepsilon|$. Проинтегрируем его на интервале $x \in (-\varepsilon, \varepsilon)$. Используя граничные условия (6.35) и (6.36) и устремляя ε к нулю, получим:

$$\begin{aligned} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \psi'' dx &= \left. \frac{d\psi_2}{dx} \right|_{x=\varepsilon} - \left. \frac{d\psi_2}{dx} \right|_{x=-\varepsilon} = -2Cke^{-k\varepsilon} \rightarrow -2Ck, \\ \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} 2q\delta(x)\psi_2(x) dx &= 2q\psi_2(0) = 2qC, \\ \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} (-k^2)\psi_2(x) dx &\approx -k^2\psi_2(0) \cdot 2\varepsilon \rightarrow 0, \end{aligned}$$

откуда

$$-2Ck + 2qC = 0, \quad \text{т.е.} \quad k = q. \quad (6.37)$$

Из условия (6.37) следует, что частица имеет только один связанный уровень энергии:

$$E = -\frac{mA^2}{2\hbar^2}. \quad (6.38)$$

При этом волновая функция частицы

$$\psi(x) = Ce^{-q|x|}.$$

Постоянную C легко найти из условия нормировки волновой функции

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx = 2|C|^2 \int_0^{+\infty} e^{-2qx} dx = \frac{|C|^2}{q} = \frac{|C|^2 \hbar^2}{m|A|}.$$

Выбирая постоянную C вещественной и положительной, получим окончательный вид волновой функции:

$$\psi(x) = \frac{\sqrt{m|A|}}{\hbar} \exp\left(-\frac{m|A|}{\hbar^2}|x|\right). \quad (6.39)$$

Замечание. Волновая функция (6.39) не является гладкой в точке $x = 0$, поскольку потенциальная энергия частицы в данной точке имеет разрыв второго рода.

Ответ: частица имеет единственный уровень энергии

$$E = -\frac{mA^2}{2\hbar^2}; \quad \psi(x) = \frac{\sqrt{m|A|}}{\hbar} \exp\left(-\frac{m|A|}{\hbar^2}|x|\right).$$

Задача 6.2.9. Стационарное состояние нерелятивистской частицы описывается волновой функцией вида $\psi(\mathbf{r}) = C \exp(i\alpha(\mathbf{r}))$, где $C = \text{const}$, а $\alpha(\mathbf{r})$ – некоторая скалярная функция радиус-вектора. Вычислить плотность потока вероятности \mathbf{j} .

Решение

По определению, плотность потока вероятности равна

$$\mathbf{j} = \frac{i\hbar}{2m} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi), \quad (6.40)$$

Подставляя в (6.40) волновую функцию из условия задачи, получим:

$$\mathbf{j} = \frac{i\hbar}{2m} |C|^2 (e^{i\alpha} (-i\nabla\alpha) e^{-i\alpha} - e^{-i\alpha} (i\nabla\alpha) e^{i\alpha}) = \frac{\hbar}{m} |C|^2 \nabla\alpha.$$

В частном случае движения свободной частицы в положительном направлении оси x её состояние будет описываться волновой функцией вида

$$\Psi(x, t) = C \exp(ikx - i\omega t), \quad \text{где } k = \frac{p}{\hbar} \text{ и } \omega = \frac{E}{\hbar}.$$

Тогда

$$j_x = \frac{\hbar}{m} k |C|^2. \quad (6.41)$$

Если в качестве волновой функции частицы взять комплексную функцию самого общего вида — $\psi(\mathbf{r}) = |\psi(\mathbf{r})| \exp(i\alpha(\mathbf{r}))$, то при вычислении плотности потока вероятности слагаемые, содержащие $\nabla|\psi(\mathbf{r})|$, сократятся, и плотность потока вероятности окажется равной $\mathbf{j} = \frac{\hbar}{m} |\psi(\mathbf{r})|^2 \nabla\alpha(\mathbf{r})$.

Замечание. Поскольку плотность потока вероятности характеризует направление движения частиц, то фаза волновой функции имеет отдельный от модуля волновой функции физический смысл, а именно: *градиент фазы волновой функции определяет направление движение частицы*. Напомним, что квадрат модуля волновой функции равен плотности вероятности обнаружения частицы в окрестности данной точки $\rho(\mathbf{r}) = |\psi(\mathbf{r})|^2$. Также отметим, что к фазе волновой функции можно добавить любую постоянную величину $\alpha(\mathbf{r}) \rightarrow \alpha(\mathbf{r}) + \text{const}$, поскольку это никак не меняет ни плотность вероятности $\rho(\mathbf{r})$, ни плотность потока вероятности $\mathbf{j}(\mathbf{r})$.

Ответ: $\mathbf{j} = \frac{\hbar}{m} |C|^2 \nabla\alpha$.

Задача 6.2.10. Свободная нерелятивистская частица массы m с энергией E движется из минус бесконечности в положительном направлении оси x . В точке $x = 0$ потенциальная энергия частицы скачком увеличивается на величину U_0 (см. рис. 6.7). Найти волновую функцию частицы $\psi(x)$ и плотность вероятности $\rho(x)$ обнаружения частицы с точностью до нормировочного множителя. Вычислить коэффициенты отражения R и прохождения T .

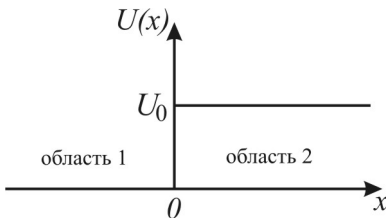


Рис. 6.7. Потенциальная энергия частицы в виде прямоугольной ступеньки.

наружения частицы с точностью до нормировочного множителя. Вычислить коэффициенты отражения R и прохождения T .

Решение

Рассмотрим решение данной задачи в трёх различных случаях: $E > U_0$ (1), $E < U_0$ (2) и $E = U_0$ (3). При этом область $x \in (-\infty, 0)$ будем называть

областью 1, а область $x \in [0, \infty)$ – областью 2.

Случай 1: $E > U_0$. В области 1 (рис. 6.7) потенциальная энергия равна нулю, и уравнение Шредингера имеет вид:

$$\psi_1'' + k_1^2 \psi_1 = 0,$$

где $k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$.

Решение этого уравнения можно записать в виде*

$$\psi_1(x) = e^{ik_1x} + A_{\text{отр}} e^{-ik_1x}. \quad (6.42)$$

Первое слагаемое в (6.42) соответствует движению частицы в положительном направлении оси x (говорят, что частица «падает» на потенциальную ступеньку), а второе слагаемое – движению частицы в отрицательном направлении оси x («отраженной» частице). Поскольку мы ищем волновую функцию с точностью до нормировочного множителя, коэффициент перед волновой функцией падающей частицы можно положить равным единице.

В области 2 потенциальная энергия равна U_0 , и уравнение Шредингера имеет вид

$$\psi_2'' + k_2^2 \psi_2 = 0, \quad \text{где } k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar}.$$

Решение этого уравнения имеет вид

$$\psi_2(x) = A_{\text{прош}} e^{ik_2x}. \quad (6.43)$$

Отметим, что функция вида $\text{const} \cdot e^{-ik_2x}$ также является решением уравнения Шредингера. Однако её следует исключить из рассмотрения по следующим соображениям. Изменить направление движения (рассеяться) частица может только в точке $x = 0$, поскольку это единственная точка, в которой изменяется потенциальная энергия. Так как по условию задачи частица изначально движется в положительном направлении оси x , то в области 2 решение $\text{const} \cdot e^{-ik_2x}$ не имеет физического смысла.

* Несмотря на то, что мы положили амплитуду $A_{\text{пад}}$ равной единице, она остается размерной величиной. В рассматриваемом нами одномерном случае амплитуды $A_{\text{пад}} = 1$, $A_{\text{отр}}$ и $A_{\text{прош}}$ имеют размерность $m^{-1/2}$.

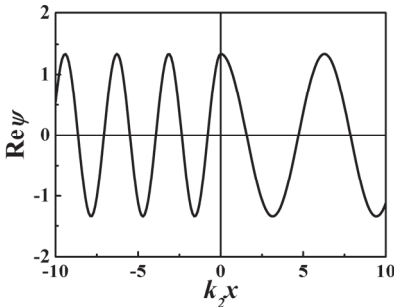


Рис. 6.8. Вещественная часть волновой функции частицы при $k_1=2k_2$ (случай 1).

Рассмотрим теперь граничные условия для волновой функции в точке $x=0$. Волновая функция должна быть непрерывна:

$$\psi_1(0) = \psi_2(0),$$

откуда с учетом (6.42) и (6.43) следует

$$1 + A_{\text{отр}} = A_{\text{прош}}, \quad (6.44)$$

и, кроме того, иметь непрерывную первую производную:

$$\psi'_1(0) = \psi'_2(0),$$

откуда

$$1 - A_{\text{отр}} = \frac{k_2}{k_1} A_{\text{прош}}. \quad (6.45)$$

Из уравнений (6.44) и (6.45) находим:

$$A_{\text{отр}} = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \quad \text{и} \quad A_{\text{прош}} = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}.$$

В результате, волновая функция частицы имеет вид (см. рис. 6.8):

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ik_1x} + \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} e^{-ik_1x}, & \text{при } x < 0; \\ \frac{2k_1}{k_1 + k_2} e^{ik_2x}, & \text{при } x \geq 0. \end{cases} \quad (6.46)$$

Плотность вероятности* обнаружить частицу равна $\rho(x) = \psi^*(x)\psi(x)$. После несложных преобразований получим:

$$\rho(x) = \begin{cases} 1 + 2 \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right) \cos(2k_1x) + \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2, & \text{при } x < 0; \\ \frac{4k_1^2}{(k_1 + k_2)^2}, & \text{при } x \geq 0. \end{cases}$$

* В случае инфинитного движения нельзя нормировать функцию $\rho(x)$ на 1.

Как видно из рис. 6.9, в области 1 плотность вероятности $\rho(x)$ изменяется от значения

$$\rho_{\min} = \frac{4k_2^2}{(k_1 + k_2)^2}$$

до

$$\rho_{\max} = \frac{4k_1^2}{(k_1 + k_2)^2}$$

с периодом $\lambda = \pi/k_1$, т.е. имеет место интерференция волновых функций падающей и отраженной частицы. В области 2 плотность вероятности постоянна и равна ρ_{\max} .

Согласно формуле (6.41), плотности потоков вероятности падающей, отраженной и прошедшей частиц равны соответственно

$$j_x^{\text{пад}} = \frac{\hbar}{m} k_1,$$

$$j_x^{\text{отр}} = -\frac{\hbar}{m} k_1 |A_{\text{отр}}|^2$$

$$\text{и } j_x^{\text{прош}} = \frac{\hbar}{m} k_2 |A_{\text{прош}}|^2.$$

Используя эти выражения, найдем коэффициенты отражения и прохождения:

$$R = \left| \frac{j_x^{\text{отр}}}{j_x^{\text{пад}}} \right| = |A_{\text{отр}}|^2 = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2$$

и

$$T = \left| \frac{j_x^{\text{прош}}}{j_x^{\text{пад}}} \right| = \frac{k_2}{k_1} |A_{\text{прош}}|^2 = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}.$$

Сумма коэффициентов отражения R и прохождения T равна 1. Отметим, что с классической точки зрения частица должна

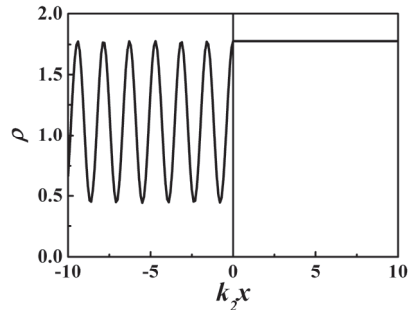


Рис. 6.9. Плотность вероятности обнаружения частицы при $k_1=2k_2$ (случай 1).

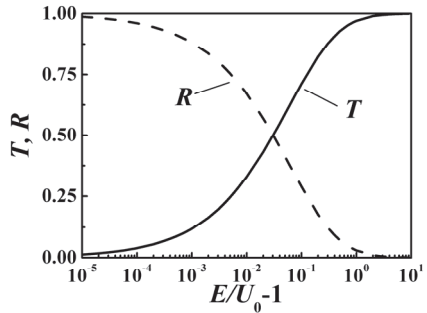


Рис. 6.10. Зависимость коэффициентов прохождения T и отражения R от $E/U_0 - 1$.

проходить из области 1 в область 2 со стопроцентной вероятностью. Действительно, при условии $E > U_0$ у частицы нет ни одной точки поворота. В точке $x=0$ импульс частицы уменьшается на величину $\Delta p = (k_1 - k_2)\hbar$, при этом частица должна продолжить движение в положительном направлении оси x . Однако, с точки зрения квантовой механики, в точке $x=0$ с вероятностью R может произойти надбарьерное отражение частицы. Зависимость коэффициентов R и T от $E/U_0 - 1$ показана на рис. 6.10.

Случай 2: $0 < E < U_0$. Уравнения Шредингера в областях 1 и 2 теперь имеют следующий вид:

$$\psi_1'' + k_1^2 \psi_1 = 0, \quad \text{где } k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

и

$$\psi_2'' - q^2 \psi_2 = 0, \quad \text{где } q = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}.$$

В принципе, волновую функцию $\psi(x)$ можно получить сразу из волновой функции (6.46), если заменить k_2 на iq . Однако полезнее решить задачу заново с самого начала. Итак, решение уравнения Шредингера в области 1 имеет вид:

$$\psi_1(x) = e^{ik_1x} + A_{\text{отр}} e^{-ik_1x}, \quad (6.47)$$

а в области 2 –

$$\psi_2(x) = A_{\text{прош}} e^{-qx} + B e^{qx}.$$

Волновая функция должна быть ограничена при $x \rightarrow \infty$, потому коэффициент $B = 0$, и волновая функция в области 2 имеет вид:

$$\psi_2(x) = A_{\text{прош}} e^{-qx}. \quad (6.48)$$

Из (6.47), (6.48) и условий непрерывности волновой функции и её первой производной в точке $x=0$ получаем соответственно

$$1 + A_{\text{отр}} = A_{\text{прош}} \quad \text{и} \quad 1 - A_{\text{отр}} = i \frac{q}{k_1} A_{\text{прош}},$$

откуда

$$A_{\text{отр}} = \frac{k_1 - iq}{k_1 + iq} \quad \text{и} \quad A_{\text{прош}} = \frac{2k_1}{k_1 + iq}.$$

В отличие от *случая 1*, $A_{\text{отр}}$ и $A_{\text{прош}}$ являются комплексными числами и более удобно представить их в виде

$$A_{\text{отр}} = e^{i\delta_{\text{отр}}}, \text{ где } \delta_{\text{отр}} = \arctg\left(-\frac{2k_1q}{k_1^2 - q^2}\right), \quad (6.49)$$

$$A_{\text{прош}} = \frac{2k_1}{\sqrt{k_1^2 + q^2}} e^{i\delta_{\text{прош}}}, \text{ где } \delta_{\text{прош}} = \arctg\left(-\frac{q}{k_1}\right). \quad (6.50)$$

Для получения выражений (6.49) и (6.50) было использовано известное алгебраическое тождество:

$$a + ib = \sqrt{a^2 + b^2} \exp\left(i \arctg\left(\frac{b}{a}\right)\right),$$

которое справедливо для любых вещественных чисел a и b . Таким образом, волновая функция частицы имеет вид (см. рис. 6.11):

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ik_1x} + e^{-ik_1x + i\delta_{\text{отр}}}, & \text{при } x < 0; \\ \frac{2k_1}{\sqrt{k_1^2 + q^2}} e^{-qx + i\delta_{\text{прош}}}, & \text{при } x \geq 0. \end{cases}$$

Плотность вероятности обнаружить частицу в окрестности точки x равна (см. рис. 6.12)

$$\rho(x) = \psi^*(x)\psi(x) = \begin{cases} 2 + 2\cos(2k_1x - \delta_{\text{отр}}), & \text{при } x < 0; \\ \frac{4k_1^2}{k_1^2 + q^2} e^{-2qx}, & \text{при } x \geq 0. \end{cases}$$

Обратим внимание на то, что при $E < U_0$ точка $x = 0$ является точкой поворота, т.е. с классической точки зрения проникновение частицы в область $x > 0$ невозможно. Однако, как мы видим, с точки зрения квантовой механики частица имеет ненулевую вероятность оказаться в окрестности любой точки x при любом конечном значении U_0 .

В пределе $U_0 \rightarrow \infty$ получим $q \rightarrow \infty$, $\delta_{\text{отр}} \rightarrow \pi$ и

$$\rho(x)|_{U_0 \rightarrow \infty} = \begin{cases} 2 - 2\cos(2k_1x), & \text{при } x < 0; \\ 0, & \text{при } x \geq 0. \end{cases}$$

Таким образом, в пределе бесконечно высокой ступеньки проникновение частицы в область $x > 0$ запрещено как в рамках классической, так и квантовой теорий.

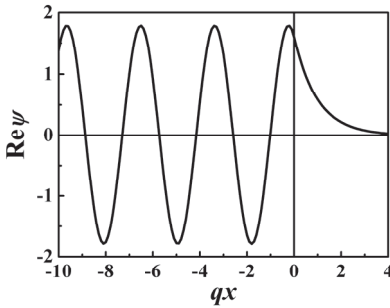


Рис. 6.11. Вещественная часть волновой функции частицы при $k_1=2q$ (случай 2).

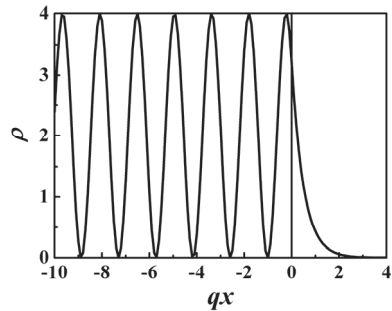


Рис. 6.12. Плотность вероятности обнаружения частицы при $k_1=2q$ (случай 2).

Вернемся к обсуждению рассеяния частицы на ступеньке конечной высоты. Плотности потоков вероятности падающей, отраженной и прошедшей частиц согласно формуле (6.41) равны

$$j_x^{\text{пад}} = \frac{\hbar}{m} k_1, \quad j_x^{\text{отр}} = -\frac{\hbar}{m} k_1 \quad \text{и} \quad j_x^{\text{прош}} = 0.$$

Следовательно, коэффициенты отражения и прохождения частицы равны соответственно

$$R = \left| \frac{j_x^{\text{отр}}}{j_x^{\text{пад}}} \right| = 1 \quad \text{и} \quad T = \left| \frac{j_x^{\text{прош}}}{j_x^{\text{пад}}} \right| = 0,$$

что находится в согласии с классическими представлениями.

Случай 3: $E = U_0$. Решение уравнения Шредингера в области 1 аналогично случаям 1 и 2:

$$\psi_1(x) = e^{ik_1x} + A_{\text{отр}} e^{-ik_1x},$$

где $k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$. В области 2 уравнение Шредингера принимает вид

$\psi_2'' = 0$. Решением этого уравнения является линейная функция

$$\psi_2(x) = Ax + B.$$

Поскольку волновая функция должна быть ограничена при $x \rightarrow \infty$, коэффициент A следует приравнять нулю, поэтому волновая функция принимает вид $\psi_2(x) = B$. Из непрерывности волновой функции и её первой производной в точке $x = 0$ получаем:

$$1 + A_{\text{отр}} = B \quad \text{и} \quad 1 - A_{\text{отр}} = 0,$$

откуда $A_{\text{отр}} = 1$ и $B = 2$. Окончательно для волновой функции и плотности вероятности находим:

$$\psi(x) = \begin{cases} 2 \cos(k_1 x), & \text{при } x < 0; \\ 2, & \text{при } x \geq 0; \end{cases}$$

$$\rho(x) = \begin{cases} 4 \cos^2(k_1 x), & \text{при } x < 0; \\ 4, & \text{при } x \geq 0. \end{cases}$$

Коэффициенты отражения и прохождения частицы равны $R = 1$ и $T = 0$ соответственно. Отметим, что все результаты для *случая 3* могут быть получены из *случая 1* при $k_2 = 0$, или из *случая 2* при $q = 0$. Тем ни менее, независимое решение задачи при $E = U_0$ весьма поучительно.

Замечание. В данной задаче рассмотрены все возможные решения уравнения Шредингера, возникающие в одномерных задачах с прямоугольными барьерами. Увеличение количества прямоугольных ступенек приводит лишь к усложнению математических выкладок, при этом методика решения задачи не изменяется.

Ответ: если $E \geq U_0$, то

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ik_1 x} + \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} e^{-ik_1 x}, & \text{при } x < 0; \\ \frac{2k_1}{k_1 + k_2} e^{ik_2 x}, & \text{при } x \geq 0. \end{cases},$$

$$\rho(x) = \begin{cases} 1 + 2 \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right) \cos(2k_1 x) + \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2, & \text{при } x < 0; \\ \frac{4k_1^2}{(k_1 + k_2)^2}, & \text{при } x \geq 0. \end{cases},$$

$$R = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2, \quad T = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2};$$

если $0 < E < U_0$, то

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ik_1x} + e^{-ik_1x + i\delta_{\text{отр}}}, & \text{при } x < 0; \\ \frac{2k_1}{\sqrt{k_1^2 + q^2}} e^{-qx + i\delta_{\text{прош}}}, & \text{при } x \geq 0. \end{cases}$$

$$\rho(x) = \begin{cases} 2 + 2 \cos(2k_1x - \delta_{\text{отр}}), & \text{при } x < 0; \\ \frac{4k_1^2}{k_1^2 + q^2} e^{-2qx}, & \text{при } x \geq 0. \end{cases}$$

$$R = 1, T = 0,$$

$$\text{где } k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar}, q = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar},$$

$$\delta_{\text{отр}} = \arctg\left(-\frac{2k_1q}{k_1^2 - q^2}\right), \delta_{\text{прош}} = \arctg\left(-\frac{q}{k_1}\right).$$

Задача 6.2.1. Свободная нерелятивистская частица массы m с энергией $E > U_0$ рассеивается на прямоугольной потенциальной ступеньке высотой U_0 (см. задачу 6.2.10). Найти отношение вероятностей P_2/P_1 обнаружить частицу на отрезке длиной $L = \pi\hbar/\sqrt{2mE}$ в областях $x < 0$ и $x > 0$. Объяснить полученный результат.

Решение

В задаче 6.2.10 было установлено, что плотность вероятности обнаружить частицу равна

$$\rho(x) = \begin{cases} 1 + 2 \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right) \cos(2k_1x) + \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2, & \text{при } x < 0; \\ \frac{4k_1^2}{(k_1 + k_2)^2}, & \text{при } x \geq 0, \end{cases}$$

$$\text{где } k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \text{ и } k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar}.$$

Необходимо отметить, что в рассматриваемом случае плотность вероятности не может быть нормирована на единицу,

поскольку интеграл $\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x) dx$ расходится. Такая ситуация характерна для случая инфинитного движения частицы. Поэтому непосредственное вычисление вероятностей P_1 и P_2 невозможно. Однако отношение этих вероятностей может быть вычислено как отношение интегралов от ненормированной плотности вероятности:

$$\frac{P_2}{P_1} = \frac{\int_{L_2} \rho(x) dx}{\int_{L_1} \rho(x) dx} \equiv \frac{I_2}{I_1}, \quad (6.51)$$

где L_1 и L_2 – отрезки длины $L = \pi\hbar/\sqrt{2mE} = \pi/k_1$ в областях $x < 0$ и $x > 0$ соответственно.

При вычислении интеграла I_1 обратим внимание на то, что $L = \pi/k_1$ – период функции $\rho(x)$ в области $x < 0$. Поэтому значение интеграла I_1 не зависит от выбора области L_1 и может быть вычислено, например, так:

$$I_1 = \int_{L_1} \rho(x) dx = \int_{-\pi/k_1}^0 \rho(x) dx = \frac{\pi}{k_1} \left[1 + \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2} \right]. \quad (6.52)$$

В области $x > 0$ функция $\rho(x)$ вообще не зависит от x , поэтому

$$I_2 = \int_{L_2} \rho(x) dx = \frac{\pi}{k_1} \frac{4k_1^2}{(k_1 + k_2)^2}. \quad (6.53)$$

Подставляя (6.52) и (6.53) в (6.51), получим:

$$\frac{P_2}{P_1} = \frac{I_2}{I_1} = \frac{2k_1^2}{k_1^2 + k_2^2}. \quad (6.54)$$

Обратим внимание на то, что $k_1 > k_2$ и, следовательно, $P_2/P_1 > 1$, т.е. вероятность обнаружить частицу в области $x > 0$ на отрезке длины $L = \pi/k_1$ больше вероятности обнаружить её в области $x < 0$ на отрезке такой же длины.

На первый взгляд данный результат кажется парадоксальным: частица преодолевает ступеньку с вероятностью $T < 1$, но при этом вероятность её обнаружения на отрезке фиксированной длины

возрастает. Для объяснения полученного результата выразим отношение P_2/P_1 через коэффициенты отражения R и прохождения T . Используя полученные в задаче 6.2.10 выражения для R и T , из (6.54) получим:

$$\frac{P_2}{P_1} = \frac{2v_1^2}{v_1^2 + v_2^2} = \frac{v_1}{v_2} \frac{T}{1+R}, \quad (6.55)$$

где $v_1 = \hbar k_1/m$ и $v_2 = \hbar k_2/m$ – скорости частицы в областях $x < 0$ и $x > 0$ соответственно. Объяснить формулу (6.55) достаточно просто. Будем считать, что за время Δt на потенциальную ступеньку из области $x < 0$ падает ΔN частиц, при этом отражается $R\Delta N$ частиц, а $T\Delta N$ продолжает движение в области $x > 0$. Тогда в области $x < 0$ на участке длины $L_1 = v_1\Delta t$ в среднем находится $N_1 = (1+R)\Delta N$ частиц. Поэтому вероятность обнаружения частицы на единицу длины в области $x < 0$ пропорциональна

$$P_1 \sim \frac{N_1}{L_1} = \frac{\Delta N (1+R)}{\Delta t v_1}. \quad (6.56)$$

Рассуждая аналогично, для вероятности обнаружения частицы в области $x > 0$ получим:

$$P_2 \sim \frac{N_2}{L_2} = \frac{\Delta N T}{\Delta t v_2}. \quad (6.57)$$

Деля (6.57) на (6.56), получим выражение (6.55). Другими словами, неравенство $P_2/P_1 > 1$ непосредственно следует из $v_1/v_2 > 1$.

Ответ: $\frac{P_2}{P_1} = \frac{2k_1^2}{k_1^2 + k_2^2}$, где $k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ и $k_2 = \frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar}$.

Задача 6.2.12. Свободная нерелятивистская частица массы m с энергией E движется из минус бесконечности в положительном направлении оси x . В точке $x = 0$ потенциальная энергия частицы скачком увеличивается на величину U_0 , а в точке $x = L > 0$ снова спадает до нуля (см. рис. 6.13).

Вычислить коэффициент прохождения T частицы.

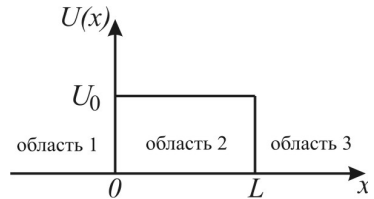


Рис. 6.13. Потенциальная энергия частицы в виде прямоугольного барьера.

Решение

Рассмотрим решение данной задачи в двух различных случаях: $E > U_0$ (1) и $E < U_0$ (2). Выделим на оси x три области: $x \in (-\infty, 0)$ – область 1, $x \in [0, L]$ – область 2, $x \in (0, \infty)$ – область 3.

Случай 1: $E > U_0$. Уравнение Шредингера в областях 1 и 3 имеет вид:

$$\psi''_{1,3} + k_1^2 \psi_{1,3} = 0, \quad \text{где } k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar},$$

а в области 2 –

$$\psi''_2 + k_2^2 \psi_2 = 0, \quad \text{где } k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar}.$$

Решение этих уравнений запишем в виде (см. задачу 6.2.10):

$$\psi_1(x) = e^{ik_1x} + A_{\text{отр}} e^{-ik_1x} \quad \text{в области 1,} \quad (6.58a)$$

$$\psi_2(x) = B e^{ik_2x} + C e^{-ik_2x} \quad \text{в области 2,} \quad (6.58б)$$

$$\psi_3(x) = A_{\text{прош}} e^{ik_1x} \quad \text{в области 3.} \quad (6.58в)$$

Неизвестные коэффициенты $A_{\text{отр}}$, $A_{\text{прош}}$, B и C находятся из условий непрерывности волновой функции и её первой производной в точках $x = 0$ и $x = L$:

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) \Rightarrow 1 + A_{\text{отр}} = B + C,$$

$$\psi_2(L) = \psi_3(L) \Rightarrow B e^{ik_2L} + C e^{-ik_2L} = A_{\text{прош}} e^{ik_1L},$$

$$\psi'_1(0) = \psi'_2(0) \Rightarrow k_1(1 - A_{\text{отр}}) = k_2(B - C),$$

$$\psi'_2(L) = \psi'_3(L) \Rightarrow k_2(B e^{ik_2L} - C e^{-ik_2L}) = k_1 A_{\text{прош}} e^{ik_1L}.$$

Решение этой системы линейных уравнений элементарно, хотя и несколько длительно. Можно выразить коэффициенты $A_{\text{отр}}$, $A_{\text{прош}}$, B и C через k_1 и k_2 , найдя, таким образом, окончательный вид волновой функции $\psi(x)$, а затем вычислить и плотность вероятности $\rho(x) = \psi^*(x)\psi(x)$. Однако, для нахождения коэффициента прохождения T необходимо знать только коэффициент $A_{\text{прош}}$:

$$A_{\text{прош}} = \frac{4k_1 k_2 e^{i(k_2 - k_1)L}}{(k_1 + k_2)^2 - (k_1 - k_2)^2 e^{2ik_2L}}.$$

После простых алгебраических преобразований получим выражение для коэффициента прохождения частицы над барьером:

$$T = \frac{\left| \frac{j_x^{\text{прош}}}{j_x^{\text{пад}}} \right|}{\left| A_{\text{прош}} \right|^2} = \frac{1}{1 + \left(\frac{k_1^2 - k_2^2}{2k_1 k_2} \right)^2 \sin^2(k_2 L)}. \quad (6.59)$$

Отметим, что коэффициент прохождения T минимален и равен $T_{\min} = \left(\frac{2k_1 k_2}{k_1^2 + k_2^2} \right)^2$ при условии $k_2 L = \pi n + \frac{\pi}{2}$, где $n = 0, 1, 2, 3, \dots$, т.е. если на ширине барьера укладывается нечетное число четвертей волны де Бройля. Максимальное значение $T_{\max} = 1$ реализуется при условии $k_2 L = \pi n$, где $n = 1, 2, 3, \dots$, т.е. когда на ширине барьера укладывается четное число четвертей волны (целое число полуволн) де Бройля.

Случай 2: $0 < E < U_0$. Вид решения уравнения Шредингера в областях 1 и 3 останется такой же, как и в *случае 1* (см. (6.58а) и (6.58в)). В области 2 вместо (6.58б) волновая функция имеет вид:

$$\psi_2(x) = B e^{-qx} + C e^{qx}, \text{ где } q = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}. \quad (6.60)$$

Решение (6.60) может быть получено из (6.58б) заменой $k_2 \rightarrow iq$. Поэтому, сделав в формуле (6.59) замену $k_2 \rightarrow iq$, получим коэффициент прохождения частицы для случая 2*:

$$T = \frac{1}{1 + \left(\frac{k_1^2 + q^2}{2k_1 q} \right)^2 \text{sh}^2(qL)}. \quad (6.61)$$

В соответствии с (6.61) для барьера любой конечной высоты $0 < U_0 < \infty$ и ширины $0 < L < \infty$ коэффициент прохождения частицы лежит в интервале $0 < T < 1$, т.е. имеется ненулевая вероятность проникновения частицы через классически запрещенную область. Данное явление имеет чисто квантовую природу и называется *туннельным эффектом*.

Если барьер достаточно высокий ($q \gg k_1$) и широкий ($qL \gg 1$), то коэффициент прохождения T можно записать в виде:

* Рекомендуется дополнительно рассмотреть *случай 2* независимо от *случая 1*.

$$T \approx \frac{16k_1^2}{q^2} e^{-2qL} = \frac{16E}{U_0 - E} \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} \cdot L\right),$$

что является частным случаем выражения

$$T = T_0 \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(U(x) - E)} dx\right). \quad (6.62)$$

В нашем случае $x_1 = 0$, $x_2 = L$, $U(x) = U_0$ и $T_0 = 16E / (U_0 - E)$.

При $E = U_0$ коэффициент прохождения может быть найден независимо (рекомендуется рассмотреть этот случай самостоятельно) или как предельный случай при $k_2 = 0$ (случай 1) или $q = 0$ (случай 2). Так или иначе, коэффициент прохождения оказывается равным $(1 + 0,25 \cdot k_1^2 L^2)^{-1}$.

Зависимость коэффициента прохождения T от отношения высоты барьера к энергии частицы U_0/E при различной ширине L и показана на рис. 6.14. Параметр α

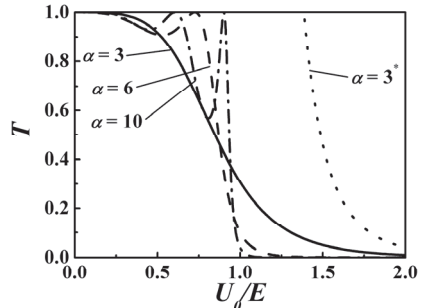


Рис. 6.14. Зависимости коэффициента прохождения частицы T от отношения высоты барьера к полной энергии частицы U_0/E при различных значениях параметра $\alpha = 3, 6, 10$. Звездочкой отмечена приближенная зависимость коэффициента прохождения при $\alpha = 3$, вычисленная по формуле (6.62).

прямо пропорционален ширине барьера: $\alpha = \sqrt{2mE} \cdot L/\hbar$. Из рисунка видно, что приближенная формула (6.62) для вычисления коэффициента прохождения приводит к неудовлетворительным результатам при $U_0/E \sim 1$, поэтому использовать её следует с осторожностью.

$$\text{Ответ: } T = \begin{cases} \frac{1}{1 + \left(\frac{k_1^2 - k_2^2}{2k_1 k_2}\right)^2 \sin^2(k_2 L)}, & \text{при } E \geq U_0; \\ \frac{1}{1 + \left(\frac{k_1^2 + q^2}{2k_1 q}\right)^2 \text{sh}^2(qL)}, & \text{при } 0 < E < U_0, \end{cases}$$

$$\text{где } k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar}, \quad q = \frac{\sqrt{2m(U_0-E)}}{\hbar}.$$

Задача 6.2.13. Свободная нерелятивистская частица массы m с энергией E движется из минус бесконечности в положительном направлении оси x . В точке $x=0$ потенциальная энергия частицы скачком увеличивается на величину $U=E$, а в точке $x=L>0$ спадает до значения $U=U_0 < E$ (см. рис. 6.15). Вычислить коэффициенты прохождения T и отражения R частицы.

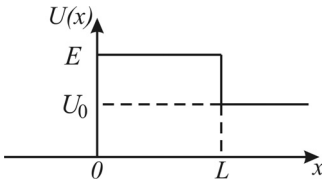


Рис. 6.15. Потенциальная энергия частицы в виде прямоугольного несимметричного потенциального барьера ширины L .

Решение

Для рассматриваемой частицы уравнение Шредингера имеет вид:

$$\psi_1'' + k_1^2 \psi_1 = 0, \quad \text{при } x < 0,$$

$$\psi_2'' = 0, \quad \text{при } x \in [0, L],$$

$$\psi_3'' + k_3^2 \psi_3 = 0, \quad \text{при } x > L,$$

$$\text{где } k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad \text{и} \quad k_3 = \frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar}.$$

Решение этих уравнений:

$$\psi_1(x) = e^{ik_1x} + A_{\text{отр}} e^{-ik_1x}, \quad \text{при } x < 0,$$

$$\psi_2(x) = B + Cx, \quad \text{при } x \in [0, L],$$

$$\psi_3(x) = A_{\text{прош}} e^{ik_3x}, \quad \text{при } x > L.$$

Коэффициенты $A_{\text{отр}}$, $A_{\text{прош}}$, B и C находятся из условий непрерывности волновой функции и её первой производной в точках $x=0$ и $x=L$:

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) \Rightarrow 1 + A_{\text{отр}} = B,$$

$$\psi_2(L) = \psi_3(L) \Rightarrow B + CL = A_{\text{прош}} e^{ik_3L},$$

$$\psi_1'(0) = \psi_2'(0) \Rightarrow ik_1(1 - A_{\text{отр}}) = C,$$

$$\psi_2'(L) = \psi_3'(L) \Rightarrow C = ik_3 A_{\text{прош}} e^{ik_3L}.$$

Коэффициенты $A_{\text{отр}}$ и $A_{\text{прош}}$ равны

$$A_{\text{отр}} = \frac{k_1 - k_3 - ik_1 k_3 L}{k_1 + k_3 - ik_1 k_3 L} \quad \text{и} \quad A_{\text{прош}} = \frac{2k_1 e^{-ik_3L}}{k_1 + k_3 - ik_1 k_3 L},$$

И для коэффициентов прохождения и отражения частицы получаем:

$$T = \left| \frac{j_x^{\text{прош}}}{j_x^{\text{пад}}} \right| = \frac{k_3}{k_1} |A_{\text{прош}}|^2 = \frac{4k_1k_3}{(k_1 + k_3)^2 + (k_1k_3L)^2}, \quad (6.63)$$

$$R = \left| \frac{j_x^{\text{отр}}}{j_x^{\text{пад}}} \right| = |A_{\text{отр}}|^2 = \frac{(k_1 - k_3)^2 + (k_1k_3L)^2}{(k_1 + k_3)^2 + (k_1k_3L)^2}. \quad (6.64)$$

Обратим внимание, что в пределе $L \rightarrow 0$ коэффициент отражения (6.63) и коэффициент прохождения (6.64) совпадают с результатами задачи 6.2.10 (случай 1). При $U_0 = 0$ (6.63) согласуется с результатами задачи 6.2.12. Также выполняется равенство $R + T = 1$.

Замечание. В рассматриваемом случае для нахождения коэффициента прохождения частицы T нельзя использовать формулу (6.62), поскольку, согласно условиям задачи, не выполняется условие $U(x) \gg E$, т.е. для частицы барьер не является высоким.

Ответ: $T = \frac{4k_1k_3}{(k_1 + k_3)^2 + (k_1k_3L)^2}, R = \frac{(k_1 - k_3)^2 + (k_1k_3L)^2}{(k_1 + k_3)^2 + (k_1k_3L)^2}$, где

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, k_3 = \frac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar}.$$

Задача 6.2.14. Свободная нерелятивистская частица массы m с энергией $E > 0$ движется из минус бесконечности в положительном направлении оси x . Найти вероятность T туннелирования частицы через потенциальный барьер $U(x) = A\delta(x)$, где $A = \text{const} > 0$.

Решение

Решение этой задачи очень похоже на решение задачи 6.2.8. Однако теперь $E > 0$ и $A > 0$, поэтому вместо (6.32) уравнение Шредингера будет иметь вид:

$$\psi'' - 2q\delta(x)\psi + k^2\psi = 0, \quad (6.65)$$

где $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ и $q = \frac{mA}{\hbar^2}$.

Как и в задаче 6.2.8, разобьем интервал $x \in (-\infty, \infty)$ на три области: $(-\infty, -\varepsilon)$, $(-\varepsilon, \varepsilon)$ и (ε, ∞) . Тогда в первой и третьей областях уравнение (6.65) принимает вид:

$$\psi'' + k^2\psi = 0,$$

а его решение:

$$\begin{aligned}\psi_1(x) &= e^{ikx} + A_{\text{отр}} e^{-ikx}, \quad \text{при } x < -\varepsilon, \\ \psi_3(x) &= A_{\text{прош}} e^{ikx}, \quad \text{при } x > \varepsilon.\end{aligned}$$

Рассмотрим граничные условия, накладываемые на волновую функцию. Волновая функция должна быть непрерывна в точке $x = 0$ при $\varepsilon \rightarrow 0$, поэтому

$$1 + A_{\text{отр}} = A_{\text{прош}} = \psi_2(0). \quad (6.66)$$

Из непрерывности первой производной волновой функции в точках $x = \pm\varepsilon$ при $\varepsilon \rightarrow 0$ получим:

$$\psi_1'(-0) = ik(1 - A_{\text{отр}}) = \psi_2'(-0) \quad \text{и} \quad \psi_3'(0) = ikA_{\text{прош}} = \psi_2'(0). \quad (6.67)$$

Рассмотрим теперь уравнение Шредингера в области $x < |\varepsilon|$. Интегрируя (6.65) на интервале $x \in (-\varepsilon, \varepsilon)$ и устремляя ε к нулю, получим:

$$\psi_2'(0) - \psi_2'(-0) = 2q\psi_2(0). \quad (6.68)$$

Подставляя в (6.68) граничные условия (6.66) и (6.67), найдем

$$1 - A_{\text{отр}} = A_{\text{прош}} \left(1 - \frac{2q}{ik} \right). \quad (6.69)$$

Из уравнений (6.69) и (6.66) имеем:

$$A_{\text{прош}} = \left(1 + \frac{iq}{k} \right)^{-1},$$

откуда для коэффициента прохождения T через потенциальный барьер получаем:

$$T = \left| \frac{j_x^{\text{прош}}}{j_x^{\text{пад}}} \right| = |A_{\text{прош}}|^2 = \frac{1}{1 + \frac{q^2}{k^2}} = \frac{1}{1 + \frac{mA^2}{2\hbar^2 E}}.$$

Замечание. Вероятность T туннелирования частицы отлична от нуля ($0 < T < 1$) и может быть сколь угодно близка к единице

при условии $E \gg \frac{mA^2}{2\hbar^2}$, несмотря на то, что потенциальный барьер бесконечно высокий. Это связано с тем, что потенциальный барьер $U(x) = A\delta(x)$ является бесконечно узким. По этой же причине при решении данной задачи нельзя использовать приближенную формулу (6.62).

$$\text{Ответ: } T = \frac{1}{1 + \frac{mA^2}{2\hbar^2 E}}.$$

Задача 6.2.15. Решить задачу 6.2.14 для случая $E > 0$, $A < 0$. Можно ли, используя результаты решения задачи о рассеянии частицы, определить энергии её связанных стационарных состояний?

Решение

Заметим, что решение задачи 6.2.14 никак не зависит от знака константы A . Поэтому коэффициент прохождения T для случая $A < 0$ равен

$$T = \frac{1}{1 + \frac{mA^2}{2\hbar^2 E}}. \quad (6.70)$$

Для определения энергий связанных стационарных состояний частицы можно формально перейти в область отрицательных энергий $E \rightarrow -|E|$. При этом волновой вектор будет чисто мнимым

$k \rightarrow \frac{\sqrt{-2m|E|}}{\hbar} = \pm i \frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar} \equiv \pm i\kappa$. Знак « \rightarrow » в последнем равенстве приводит к физически абсурдному результату: при $x \rightarrow \infty$ волновая функция неограниченно возрастает. При выборе знака « $+$ » волновая функция частицы имеет вид:

$$\psi(x) = \begin{cases} A_{\text{пад}} e^{-\kappa x} + A_{\text{отр}} e^{\kappa x} & \text{при } x < 0 \\ A_{\text{прош}} e^{-\kappa x} & \text{при } x \geq 0 \end{cases}.$$

При решении задачи 6.2.14 принималось, что константа $A_{\text{пад}}$ равна единице. Теперь удобнее выписать её в явном виде. Волновая функция удовлетворяет условию $|\psi(x \rightarrow -\infty)| < \infty$ только в том

случае, если $A_{\text{пад}} \rightarrow 0$. Чтобы волновая функция была отлична от нуля вблизи точки $x=0$, формально коэффициент прохождения частицы (6.70) должен стремиться к бесконечности

$$T = \left| \frac{A_{\text{прош}}}{A_{\text{пад}}} \right|^2 = \frac{1}{1 - \frac{mA^2}{2\hbar^2|E|}} \rightarrow \infty,$$

откуда

$$E = -|E| = -\frac{mA^2}{2\hbar^2}.$$

Полученный результат в точности совпадает с энергией связанного стационарного состояния (6.38), найденной в **задаче 6.2.8**.

Таким образом, если известен коэффициент надбарьерного прохождения (или отражения) частицы, то можно найти энергии связанных стационарных состояний частицы в том же потенциале, переходя формально в область отрицательных энергий и находя полюсы коэффициента прохождения (или отражения)*.

Ответ: $T = \frac{1}{1 + \frac{mA^2}{2\hbar^2 E}}, E = -\frac{mA^2}{2\hbar^2}.$

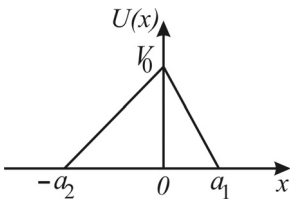


Рис. 6.16. Потенциальная энергия частицы в виде треугольника основанием ширины $a=a_1+a_2$.

Задача 6.2.16. Найти коэффициент прохождения нерелятивистской частицы массы m через треугольный потенциальный барьер, высота которого V_0 , а ширина основания a (см. рис. 6.16). Энергия частицы $0 < E \ll V_0$. Вычислить

только экспоненциальный множитель. Зависит ли коэффициент прохождения от положения вершины треугольника?

Решение

Если потенциальная энергия линейно зависит от x , то решение уравнения Шредингера не выражается в элементарных функциях.

* Данное утверждение является частным случаем известной в квантовой механике теоремы о связи полюсов амплитуды рассеяния с энергиями связанных состояний.

Однако если барьер достаточно высокий $V_0 \gg E$ и широкий $a \gg \frac{\hbar}{\sqrt{2mV_0}}$, то коэффициент прохождения можно вычислить по формуле (6.62):

$$T = T_0 \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(U(x) - E)} dx\right).$$

Разделим потенциальный барьер на два прямоугольных треугольника с основаниями a_1 и a_2 , как показано на рис. 6.16. Очевидно, что $T = T_1 \cdot T_2$, где T_1 и T_2 – коэффициенты прохождения через первый и второй потенциальные барьеры соответственно.

Вычислим сначала коэффициент T_1 . Для этого найдем вначале классические точки поворота x_1 и x_2 . Очевидно, что $x_1 = 0$, а x_2 находится из уравнения $U(x) = E$. На интервале $x \in [0, a_1]$ потенциальная энергия имеет вид:

$$U(x) = V_0 - \frac{V_0}{a_1} x.$$

Из уравнения $V_0 \left(1 - \frac{x_2}{a_1}\right) = E$ находим: $x_2 = a_1 \left(1 - \frac{E}{V_0}\right)$. Затем

вычислим интеграл

$$\begin{aligned} I &= \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(U(x) - E)} dx = \int_0^{x_2} \sqrt{2m\left(V_0 - \frac{V_0}{a_1} x - E\right)} dx = \\ &= \sqrt{\frac{2mV_0}{a_1}} \int_0^{x_2} \sqrt{x_2 - x} dx = \frac{2}{3} \sqrt{2m} \frac{(V_0 - E)^{3/2}}{V_0} a_1. \end{aligned}$$

Тогда коэффициент прохождения T_1 равен

$$T_1 = T_{01} \exp\left(-\frac{4}{3\hbar} \sqrt{2m} \frac{(V_0 - E)^{3/2}}{V_0} a_1\right). \quad (6.71)$$

Поскольку коэффициент прохождения не зависит от направления движения частицы, то выражение для коэффициента прохождения T_2 получим, сделав в (6.71) замены $a_1 \rightarrow a_2$ и $T_{01} \rightarrow T_{02}$. В итоге искомый коэффициент прохождения T равен

$$T = T_1 T_2 = T_0 \exp\left(-\frac{4}{3\hbar} \sqrt{2m} \frac{(V_0 - E)^{3/2}}{V_0} a\right), \quad (6.72)$$

где $T_0 = T_{01} \cdot T_{02}$ и $a = a_1 + a_2$.

В соответствии с (6.72) экспоненциальный множитель зависит только от высоты V_0 треугольного барьера и от ширины a его основания и не зависит от положения вершины треугольника.

Ответ: $T = T_0 \exp\left(-\frac{4}{3\hbar} \sqrt{2m} \frac{(V_0 - E)^{3/2}}{V_0} a\right)$; коэффициент прохождения не зависит от положения вершины треугольного барьера.

Задача 6.2.17. Определить вероятность выхода α -частицы с энергией E из ядра радиуса r_0 с атомным номером Z . С точностью до экспоненциального множителя найти зависимость периода полураспада $\tau_{1/2}$ радиоактивных элементов от энергии вылетающих α -частиц.

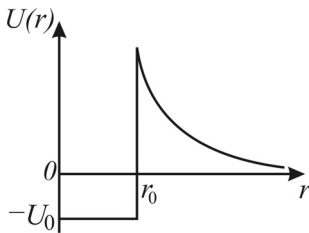


Рис. 6.17. Потенциальная энергия α -частицы в тяжелом ядре радиусом r_0 .

Решение

Напомним, что α -частицей называется ядро атома гелия ${}^4_2\text{He}$. Внутри ядра на α -частицу действуют силы ядерного притяжения многократно превышающие силы электростатического отталкивания. Однако ядерные силы обладают малым радиусом действия ($\sim 10^{-15}$ м), поэтому за пределами ядра на α -частицу действуют только силы кулоновского

отталкивания. Потенциальную энергию α -частицы можно записать в виде* (см. рис. 6.17)

$$U(r) = \begin{cases} -U_0 & \text{при } r \leq r_0 \\ \frac{\alpha}{r} & \text{при } r > r_0 \end{cases},$$

* Для решения данной задачи вид потенциальной энергии при $r \leq r_0$ не важен.

$$\text{где } \alpha = \frac{2(Z-2)q_e^2}{4\pi\epsilon_0}.$$

Для того, чтобы α -частица могла вылететь из ядра, она должна находиться на метастабильном уровне с энергией $E > 0$. Будем полагать, что $E \ll \alpha/r_0$, тогда кулоновский потенциальный барьер для α -частицы будет достаточно высоким и одновременно широким. В этом случае вероятность вылета α -частицы (коэффициент прохождения через потенциальный барьер) можно вычислить по формуле:

$$T = T_0 \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_{r_0}^{\eta} \sqrt{2m(U(r)-E)} dr\right), \quad (6.73)$$

где $m \approx 4M_p$ – масса α -частицы, а $r_1 = \frac{\alpha}{E}$ – классическая точка поворота (находится из уравнения $U(r) = E$). Для решения задачи нам необходимо вычислить интеграл:

$$I = \int_{r_0}^{\eta} \sqrt{2m\left(\frac{\alpha}{r} - E\right)} dr.$$

После замены переменных $r = r_1 x^2$ получим

$$I = 2r_1 \sqrt{2mE} \int_{\sqrt{r_0/r_1}}^1 \sqrt{1-x^2} dx = r_1 \sqrt{2mE} \left(\arccos \sqrt{\frac{r_0}{r_1}} - \sqrt{\frac{r_0}{r_1}} \sqrt{1 - \frac{r_0}{r_1}} \right).$$

Из условия $E \ll \alpha/r_0$ следует, что $r_0/r \ll 1$. Поэтому

$$I \approx r_1 \sqrt{2mE} \frac{\pi}{2} = \frac{\pi\alpha}{2} \sqrt{\frac{2m}{E}}. \quad (6.74)$$

Подставляя (6.74) в (6.73), найдем коэффициент прохождения α -частицы через кулоновский барьер:

$$T = T_0 \exp\left(-\frac{\pi\alpha}{\hbar} \sqrt{\frac{2m}{E}}\right). \quad (6.75)$$

Частота вылета α -частиц прямо пропорциональна вероятности туннелирования $\nu \sim T$. В свою очередь период полураспада ядра

обратно пропорционален частоте вылета: $\tau_{1/2} \sim v^{-1} \sim T^{-1}$. Таким образом, из (6.75) следует, что

$$\tau_{1/2} = \tau_0 \exp\left(\frac{\pi\alpha}{\hbar} \sqrt{\frac{2m}{E}}\right), \quad (6.76)$$

где τ_0 – константа порядка 10^{-21} с, для точного определения которой необходимо знать вид потенциальной энергии при $r \leq r_0$. Логарифмируя выражение (6.76), получим приближенную зависимость (см. рис. 6.18):

$$\ln \tau_{1/2} = \ln \tau_0 + \frac{A}{\sqrt{E}}, \quad (6.77)$$

где $A = \frac{\pi\alpha\sqrt{2m}}{\hbar} = \frac{(Z-2)q_e^2\sqrt{2m}}{2\hbar\epsilon_0}$.

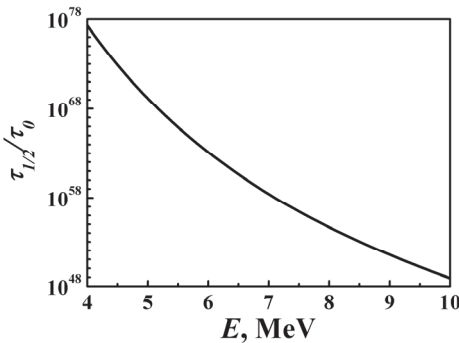


Рис. 6.18. Зависимость отношения времени полураспада к τ_0 от энергии E вылетающих α -частиц. Кривая построена для $Z=92$.

полагают, что для различных ядер константы $\ln \tau_0$ и A (для тяжелых ядер $Z \geq 84$) примерно одинаковы. Тогда зависимость (6.77) качественно согласуется с экспериментом. На рис. 6.18 приведена зависимость отношения $\tau_{1/2}/\tau_0$ от энергии E вылетающих α -частиц. Видно, что при увеличении энергии α -частиц от 4 до 10 МэВ время полураспада ядра уменьшается примерно в 10^{30} раз!

Ответ: $\tau_{1/2} = \tau_0 \exp\left(\frac{\pi\alpha}{\hbar} \sqrt{\frac{2m}{E}}\right)$.

Замечание. Проверить зависимость (6.77) экспериментально для какого-то одного изотопа невозможно, поскольку из одинаковых ядер α -частицы вылетают всегда с одной и той же энергией, равной энергии метастабильного уровня. Поэтому проверить полученную зависимость можно, только рассматривая α -распады различных ядер. При этом

Задача 6.2.18. Потенциальная энергия нерелятивистской частицы массы m имеет вид: $U(x) = \begin{cases} A\delta(x), & |x| \leq a, \\ U_0, & |x| > a, \end{cases}$ где $A < 0$, $U_0 < 0$, $a > 0$ – константы, удовлетворяющие следующим условиям:

- (1) Единственный уровень энергии частицы в δ -образном потенциале (см. задачу 6.2.8) превышает энергию частицы на бесконечности ($|U_0| > \frac{mA^2}{2\hbar^2}$), т.е. этот уровень энергии является квазистационарным (метастабильным);
- (2) В начальный момент времени частица находится в этом квазистационарном состоянии, т.е. локализована вблизи точки $x = 0$;
- (3) Барьер, который частице необходимо преодолеть для вылета из δ -образной ямы, является достаточно широким $\frac{m^2 A^2 a^2}{\hbar^4} \gg 1$.

Найти энергию E квазистационарного состояния и время жизни частицы τ в этом состоянии.

Решение

Выделим на оси x пять областей: $x \in (-\infty, -a)$, $x \in [-a, -\varepsilon)$, $x \in [-\varepsilon, \varepsilon]$, $x \in (\varepsilon, a]$ и $x \in (a, \infty)$. В этих областях уравнение Шредингера имеет следующий вид:

$$\psi''_{1,5} + k^2 \psi_{1,5} = 0 \quad \text{при } x \in (-\infty, -a) \cup (a, \infty), \quad (6.77a)$$

$$\psi''_{2,4} - q^2 \psi_{2,4} = 0 \quad \text{при } x \in [-a, -\varepsilon) \cup (\varepsilon, a], \quad (6.77б)$$

$$\psi''_3 + 2\eta\delta(x)\psi_3 - q^2\psi_3 = 0 \quad \text{при } x \in [-\varepsilon, \varepsilon], \quad (6.77в)$$

где $k = \frac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar}$, $q = \frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar}$ и $\eta = \frac{m|A|}{\hbar^2}$. В силу условия (1)

задачи константа k – вещественная.

Поскольку в силу условия (2) задачи частица в начальный момент локализована вблизи точки $x = 0$, то решения уравнения (6.77a) будут иметь вид расходящихся из начала координат плоских волн:

$$\psi_1(x) = C_1 e^{-ikx}, \quad \text{при } x \in (-\infty, -a), \quad (6.78a)$$

$$\Psi_5(x) = C_5 e^{ikx}, \quad \text{при } x \in (a, \infty). \quad (6.78б)$$

Решения уравнения (6.77б) имеют вид:

$$\Psi_2(x) = C_{21} e^{qx} + C_{22} e^{-qx}, \quad \text{при } x \in [-a, -\varepsilon), \quad (6.79а)$$

$$\Psi_4(x) = C_{41} e^{qx} + C_{42} e^{-qx}, \quad \text{при } x \in (\varepsilon, a]. \quad (6.79б)$$

Поскольку по условию задачи потенциальная энергия частицы – четная функция $U(-x) = U(x)$, волновая функция частицы может быть либо четной, либо нечетной функцией (см. **задачу 6.4.5**). А из условия непрерывности волновой функции в точке $x = 0$:

$$\Psi_2(0) = \Psi_3(0) = \Psi_4(0) \quad (6.80)$$

следует, что волновая функция четная: $\Psi(-x) = \Psi(x)$, поскольку в силу условия (2) задачи $\Psi(0) \neq 0$. Таким образом, из (6.78а), (6.78б), (6.79а), (6.79б) и (6.80) получаем следующие соотношения между коэффициентами:

$$C_{41} = C_{22}, \quad C_{42} = C_{21}, \quad C_5 = C_1 \quad \text{и} \quad C_{21} + C_{22} = \Psi_3(0). \quad (6.81)$$

Из непрерывности первой производной волновой функции в точках $x = \pm\varepsilon$ имеем:

$$\left. \frac{d\Psi_3}{dx} \right|_{x=-\varepsilon} = q(C_{21} e^{-q\varepsilon} - C_{22} e^{q\varepsilon}) \quad \text{и} \quad \left. \frac{d\Psi_3}{dx} \right|_{x=\varepsilon} = q(C_{22} e^{q\varepsilon} - C_{21} e^{-q\varepsilon}). \quad (6.82)$$

Интегрируя уравнение (6.77в) на отрезке $x \in [-\varepsilon, \varepsilon]$, в пределе $\varepsilon \rightarrow 0$ с учетом (6.80), (6.81) и (6.82) (аналогично **задачам 6.2.8** и **6.2.14**) получим условие, связывающее коэффициенты C_{12} и C_{22}

$$q(C_{21} - C_{22}) = \eta(C_{21} + C_{22}). \quad (6.83)$$

Рассмотрим теперь граничные условия в точке $x = a$. Из (6.78б), (6.79б) и условий непрерывности волновой функции $\Psi_4(a) = \Psi_5(a)$ и её первой производной $\Psi'_4(a) = \Psi'_5(a)$, получим систему уравнений:

$$\begin{aligned} C_{22} e^{qa} + C_{21} e^{-qa} &= C_5 e^{ika}, \\ q(C_{22} e^{qa} - C_{21} e^{-qa}) &= ik C_5 e^{ika}, \end{aligned}$$

откуда

$$q(C_{22} e^{qa} - C_{21} e^{-qa}) = ik(C_{22} e^{qa} + C_{21} e^{-qa}). \quad (6.84)$$

Легко проверить, что граничные условия в точке $x = -a$ также приводят к соотношению (6.84). Система уравнений (6.83) и (6.84)

является линейной и однородной относительно коэффициентов C_{12} и C_{22} . Она имеет нетривиальное решение при условии:

$$q - \eta = (q + \eta) \frac{q^2 - k^2 + 2ikq}{q^2 + k^2} e^{-2qa}. \quad (6.85)$$

Решая уравнение (6.85), можно найти как энергию квазистационарного состояния, так и время его жизни. Это несложно сделать, если воспользоваться условием (3) задачи, согласно которому $qa \gg 1$, и, следовательно, уравнение (6.85) можно решать методом последовательных приближений. В нулевом приближении пренебрегаем правой частью уравнения (6.85) и получаем:

$$q - \eta = 0.$$

Откуда получаем единственный уровень энергии:

$$E_0 = -\frac{mA^2}{2\hbar^2}.$$

Данный результат был получен ранее в задаче 6.2.8, что неудивительно, поскольку в пределе $qa \rightarrow \infty$ рассматриваемая задача переходит в задачу 6.2.8. В следующем приближении ищем q в виде $q = \eta + q_1$, причем в правой части равенства (6.85) поправкой q_1 можно пренебречь. Тогда для поправки q_1 получим:

$$q_1 = 2\eta \frac{\eta^2 - k_0^2 + 2ik_0\eta}{\eta^2 + k_0^2} e^{-2\eta a},$$

где $k_0 = k|_{E=E_0} = \frac{\sqrt{2m(|U_0| - |E_0|)}}{\hbar}$.

Выражая k_0 и η через $|U_0|$ и $|E_0|$, находим:

$$q_1 = 4 \frac{\sqrt{2m|E_0|}}{\hbar} \frac{|E_0|}{|U_0|} \left[\left(1 - \frac{1}{2} \frac{|U_0|}{|E_0|} \right) + i \sqrt{\frac{|U_0|}{|E_0|} - 1} \right] \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m|E_0|} a \right).$$

В этом же приближении энергия квазистационарного состояния равна

$$E = -\frac{\hbar^2 q^2}{2m} \approx -\frac{\hbar^2}{2m} (\eta^2 + 2\eta q_1) = -|E_0| + E_1 - iE_2, \quad (6.86)$$

где

$$E_1 = -8 \frac{|E_0|^2}{|U_0|} \left(1 - \frac{1}{2} \frac{|U_0|}{|E_0|} \right) \exp \left(-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m|E_0|} a \right),$$

$$E_2 = 8 \frac{|E_0|^2}{|U_0|} \sqrt{\frac{|U_0|}{|E_0|} - 1} \exp \left(-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m|E_0|} a \right).$$

Обсудим формулу (6.86) более подробно. Из двух малых добавок к стационарному уровню энергии $E = -|E_0|$, первая добавка E_1 – вещественная. Она отвечает за небольшой сдвиг уровня энергии вверх или вниз, в зависимости от знака скобки $(1 - |U_0|/2|E_0|)$. Чтобы выяснить физический смысл второй, чисто мнимой, добавки к энергии учтем, что в общем случае волновая функция стационарного состояния имеет вид:

$$\Psi(x, t) = \psi(x) \exp \left(-\frac{i}{\hbar} E t \right).$$

Подставляя вместо E выражение (6.86), получим

$$\Psi(x, t) = \left[\psi(x) \exp \left(\frac{i}{\hbar} |E_0| t - \frac{i}{\hbar} E_1 t \right) \right] \exp \left(-\frac{E_2 t}{\hbar} \right).$$

Видно, что плотность вероятности обнаружения частицы

$$\rho(x, t) = |\Psi(x, t)|^2 = |\psi(x)|^2 \exp \left(-\frac{2E_2 t}{\hbar} \right) \quad (6.87)$$

экспоненциально убывает со временем. Время, за которое плотность вероятности (6.87) уменьшается в e раз, называется *временем жизни* квазистационарного состояния.

Из (6.86) и (6.87) следует, что время жизни квазистационарного состояния равно

$$\tau = \frac{\hbar}{2E_2} = \frac{\hbar |U_0|}{16|E_0|^2} \left(\frac{|U_0|}{|E_0|} - 1 \right)^{-1/2} \exp \left(\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m|E_0|} a \right).$$

Замечания.

1. При решении задачи учитывался тот факт, что полученное состояние является квазистационарным, т.е. время жизни состояния велико $\tau \gg \hbar/|E_0|$. Это обстоятельство позволило найти энергию состояния из стационарного уравнения Шредингера. В общем случае, когда условие $\tau \gg \hbar/|E_0|$ не выполняется, необходимо решать нестационарное уравнение Шредингера.

2. Время жизни квазистационарного состояния всегда связано с наличием чисто мнимой добавки к энергии стационарного состояния. При этом чисто мнимую добавку $-iE_2$ можно интерпретировать как ширину энергетического уровня $\Delta E = |E_2|$. Тогда время жизни частицы на данном уровне связано с шириной уровня соотношением $\Delta E \tau \sim \hbar$. Таким образом, снова приходим к соотношению Гейзенберга для энергии и времени. Напомним, что более простая интерпретация этого соотношения была рассмотрена в задаче 5.2.8.

$$\text{Ответ: } E = -|E_0| - 8 \frac{|E_0|^2}{|U_0|} \left(1 - \frac{|U_0|}{2|E_0|} \right) \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m|E_0|} a\right),$$

$$\tau = \frac{\hbar}{2E_2} = \frac{\hbar|U_0|}{16|E_0|^2} \left(\left| \frac{U_0}{E_0} \right| - 1 \right)^{-1/2} \exp\left(\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m|E_0|} a\right),$$

$$\text{где } E_0 = -\frac{mA^2}{2\hbar^2}.$$

6.3. Короткие задачи

Задача 6.3.1. Частица массы m находится в прямоугольной потенциальной яме ширины L с бесконечно высокими стенками. В некоторый момент времени $t = 0$ волновая функция частицы имеет вид:

$$\Psi(x, 0) = \alpha \psi_1(x) + \beta \psi_3(x),$$

где α и β – вещественные положительные константы. Найти α и β , если известно, что средняя энергия частицы равна E_2 .

Решение

Коэффициенты α и β – это амплитуды вероятности обнаружить частицу в состояниях с энергиями соответственно E_1 и E_3 . Поэтому коэффициенты α и β должны быть нормированы условием $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$, а средняя энергия частицы в состоянии $\Psi(x, 0)$ равна $\bar{E} = |\alpha|^2 E_1 + |\beta|^2 E_3$. Из задачи 6.2.1 следует, что

$E_1 : E_2 : E_3 = 1 : 4 : 9$. Поэтому $|\alpha|^2$ и $|\beta|^2$ находятся из системы линейных уравнений:

$$\begin{cases} |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1, \\ |\alpha|^2 + 9|\beta|^2 = 4. \end{cases}$$

Отсюда $|\alpha|^2 = 5/8$ и $|\beta|^2 = 3/8$. По условию задачи, коэффициенты α и β – вещественные и положительные. В результате,

$$\alpha = \sqrt{\frac{5}{8}} \quad \text{и} \quad \beta = \sqrt{\frac{3}{8}}.$$

Ответ: $\alpha = \sqrt{\frac{5}{8}}, \beta = \sqrt{\frac{3}{8}}.$

Задача 6.3.2. Частица массы m находится в прямоугольной потенциальной яме с одной бесконечно высокой стенкой (см. задачу 6.2.5). Глубина ямы U_0 совпадает с энергией E_{10} десятого стационарного состояния частицы. Найти ширину L потенциальной ямы и оценить энергию E_1 основного состояния частицы.

Решение

Для нахождения ширины ямы L воспользуемся условием существования n -го стационарного состояния частицы, полученным в задаче 6.2.5:

$$\frac{2mU_0L^2}{\hbar^2} = \frac{\pi^2}{4}(2n-1)^2.$$

Для $n = 10$, получим:

$$L = \frac{19\pi}{2} \frac{\hbar}{\sqrt{2mU_0}}.$$

При оценке энергии первого стационарного состояния частицы учтем, что

$$R = \frac{L\sqrt{2mU_0}}{\hbar} = \frac{19\pi}{2} \gg 1,$$

поэтому наименьшее положительное решение уравнения

$$-\xi \operatorname{ctg}(\xi) = \sqrt{R^2 - \xi^2}$$

соответствует $\xi_1 \approx \pi$. Следовательно, энергия (отсчитываемая от дна ямы) основного состояния частицы равна

$$E_1 = \frac{\hbar^2 \xi_1^2}{2mL^2} \approx \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} = \left(\frac{2}{19}\right)^2 U_0 \approx 0,011 \cdot U_0.$$

Ответ: $L = \frac{19\pi}{2} \frac{\hbar}{\sqrt{2mU_0}}$, $E_1 \approx 0,011 \cdot U_0$.

Задача 6.3.3. Рассмотрим гармонический осциллятор в основном состоянии. Чему равна вероятность $P_{\text{кл}}$ обнаружить его в классически разрешенной области движения.

Решение

Энергия и волновая функция основного состояния гармонического осциллятора были найдены в задаче 6.2.7:

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} \quad \text{и} \quad \psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right].$$

Границы классически разрешенной области движения (классические точки поворота) находятся из уравнения:

$$U(x) = E_0 \quad \Rightarrow \quad \frac{m\omega^2 x^2}{2} = \frac{\hbar\omega}{2},$$

откуда

$$x_{1,2} = \pm x_0, \quad \text{где} \quad x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}.$$

Вероятность обнаружить гармонический осциллятор в классически разрешенной области движения равна

$$\begin{aligned} P_{\text{кл}} &= \int_{-x_0}^{x_0} |\psi_0|^2 dx = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \int_{-x_0}^{x_0} \exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar}x^2\right) dx = \frac{1}{x_0\sqrt{\pi}} \int_{-x_0}^{x_0} \exp\left(-\frac{x^2}{x_0^2}\right) dx = \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-1}^1 \exp(-y^2) dy = \text{erf}(1) \approx 0,84. \end{aligned}$$

Замечание. Функция $\text{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-y^2} dy$ называется функцией ошибок.

Ответ: $P_{\text{кл}} \approx 0,84$.

Задача 6.3.4. Нерелятивистская частица массы m находится в связанном состоянии в потенциале $U(x) = A\delta(x)$, где $A = \text{const} < 0$. Найти среднее значение её координаты \bar{x} и дисперсию D_x .

Решение

В задаче 6.2.8 было показано, что частица в потенциале $U(x) = A\delta(x)$ имеет только одно связанное стационарное состояние, в котором её волновая функция имеет вид:

$$\psi(x) = \frac{\sqrt{m|A|}}{\hbar} \exp\left(-\frac{m|A|}{\hbar^2}|x|\right).$$

Плотность вероятности $\rho(x)$ обнаружить частицу в окрестности точки x равна

$$\rho(x) = |\psi(x)|^2 = \frac{\alpha}{2} e^{-\alpha|x|}, \quad \text{где } \alpha = \frac{2m|A|}{\hbar^2}.$$

Среднее значение положения частицы равно

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} x\rho(x)dx = \frac{\alpha}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} xe^{-\alpha|x|}dx = 0,$$

а дисперсия –

$$\begin{aligned} D_x &= \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \rho(x)dx = \alpha \int_0^{+\infty} x^2 e^{-\alpha x} dx = \alpha \frac{d^2}{d\alpha^2} \int_0^{+\infty} e^{-\alpha x} dx = \\ &= \alpha \frac{d^2}{d\alpha^2} \left(\frac{1}{\alpha} \right) = \frac{2}{\alpha^2} = \frac{\hbar^4}{2m^2 A^2}. \end{aligned}$$

Ответ: $\bar{x} = 0$, $D_x = \frac{\hbar^4}{2m^2 A^2}$.

Задача 6.3.5. Найти плотность потока вероятности \mathbf{j} для состояния с волновой функцией $\psi(x) = A \left[\exp(ikx) + \frac{i}{2} \exp(-ikx) \right]$, где $A \in \mathbb{C}$, $k \in \mathbb{R}$ – константы.

Решение

Подставляя заданную волновую функцию в определение плотности потока вероятности, получим:

$$\begin{aligned} \mathbf{j} &= \frac{i\hbar}{2m} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi) = \\ &= \mathbf{e}_x \frac{i\hbar}{2m} |A|^2 (-ik) \left[\left(e^{ikx} + \frac{i}{2} e^{-ikx} \right) \left(e^{-ikx} + \frac{i}{2} e^{ikx} \right) + \text{к.с.} \right] = \mathbf{e}_x \frac{3\hbar k}{4m} |A|^2. \end{aligned}$$

Замечание. Если записать волновую функцию $\psi(x)$ в виде суммы $\psi(x) = \psi_1(x) + \psi_2(x)$, где $\psi_1(x) = Ae^{ikx}$ и $\psi_2(x) = \frac{iA}{2} e^{-ikx}$, и вычислить плотности потока вероятности $\mathbf{j}_1 = \mathbf{e}_x \frac{\hbar k}{m} |A|^2$ и $\mathbf{j}_2 = -\mathbf{e}_x \frac{\hbar k}{m} \frac{|A|^2}{4}$ для каждой из этих волновых функций отдельно, то будет выполняться соотношение $\mathbf{j} = \mathbf{j}_1 + \mathbf{j}_2$. Однако, надо помнить, что в общем случае $\mathbf{j} \neq \mathbf{j}_1 + \mathbf{j}_2$. В качестве примера см. задачу 6.4.17.

Ответ: $\mathbf{j} = \mathbf{e}_x \frac{3\hbar k}{4m} |A|^2$.

Задача 6.3.6. Свободная нерелятивистская частица с энергией E рассеивается на прямоугольной потенциальной ступеньке (см. задачу 6.2.10). Найти высоту ступеньки U_0 , если известно, что коэффициент отражения частицы R равен коэффициенту прохождения T .

Решение

Из условия задачи следует, что нужно рассматривать случай $E > U_0$. Для этого случая в задаче 6.2.10 были получены следующие выражения для коэффициентов отражения и прохождения частицы:

$$R = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2 \quad \text{и} \quad T = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2},$$

где $k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ и $k_2 = \frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar}$. Из условия $R = T$ после алгебраических преобразований получим квадратное уравнение:

$$U_0^2 + 32EU_0 - 32E^2 = 0.$$

Решая его, находим:

$$U_0 = 4(3\sqrt{2} - 4)E \approx 0,97E.$$

Ответ: $U_0 = 4(3\sqrt{2} - 4)E.$

Задача 6.3.7. Свободная нерелятивистская частица с энергией E туннелирует последовательно через n одинаковых прямоугольных потенциальных барьеров высоты U_0 и ширины L . Допустим, что мы хотим заменить эту систему барьеров одним барьером ширины L и такой высоты U , чтобы коэффициент прохождения частицы T не изменился. Найти U , считая что $U_0 \gg E$ и $\sqrt{2mU_0}L \gg \hbar$.

Решение

Согласно сделанным в условии задачи предположениям, каждый из n барьеров (и тем более эквивалентный им барьер высоты U) можно считать высоким и широким. Поэтому коэффициент прохождения через систему из n барьеров равен

$$T = \prod_{i=1}^n T_i = T_0 \exp\left(-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2mU_0}(nL)\right),$$

а коэффициент прохождения через эквивалентный барьер:

$$T_{\text{эКВ}} = T_{0,\text{эКВ}} \exp\left(-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2mUL}\right).$$

Считая, что $T_{0,\text{эКВ}} \approx T_0$, из равенства $T_{\text{эКВ}} = T$ находим:

$$U = n^2 U_0.$$

Ответ: $U = n^2 U_0.$

Задача 6.3.8. Свободная нерелятивистская частица массы m с энергией E туннелирует через практически прямоугольный потенциальный барьер $U(x) = \begin{cases} U_0 + V(x), & x \in (0, L) \\ 0, & x \notin (0, L) \end{cases}$, где $V(x)$ – интегрируемая на отрезке $x \in [0, L]$ поправка к потенциальной энергии ($\int_0^L V(x)dx = A$), малая по сравнению с разностью энергий $(U_0 - E)$. Вычислить коэффициент прохождения T частицы с

точностью до предэкспоненциального множителя, считая барьер достаточно высоким и широким.

Решение

При выполнении условий $U_0 \gg E$ и $\sqrt{2mU_0}L \gg \hbar$ коэффициент прохождения может быть вычислен по формуле:

$$T = T_0 \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_0^L \sqrt{2m(U_0 + V(x) - E)} dx\right). \quad (6.88)$$

Используя условие малости поправки $V(x)$, (6.88) можно переписать в виде:

$$\begin{aligned} T &= T_0 \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} \int_0^L \sqrt{1 + \frac{V(x)}{(U_0 - E)}} dx\right) \approx \\ &\approx T_0 \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} \int_0^L \left(1 + \frac{V(x)}{2(U_0 - E)}\right) dx\right) = \\ &= T_0 \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} \left[L + \frac{A}{2(U_0 - E)}\right]\right). \end{aligned}$$

Обратим внимание на то, что если $A = \int_0^L V(x) dx = 0$, то в

рассматриваемом приближении коэффициент прохождения T такой же, как и для прямоугольного барьера.

Ответ:
$$T = T_0 \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} \left[L + \frac{A}{2(U_0 - E)}\right]\right).$$

6.4. Задачи для самостоятельного решения

Задача 6.4.1. Частица массы m находится в одномерной, прямоугольной, бесконечно глубокой потенциальной яме шириной L (см. задачу 6.2.1). Найти среднее значение координаты \bar{x}_n и дисперсию $D_{x,n}$ для частицы в n -ом стационарном состоянии.

Ответ:
$$\bar{x}_n = \frac{L}{2}, \quad D_{x,n} = L^2 \left(\frac{1}{12} - \frac{1}{2\pi^2 n^2}\right).$$

Задача 6.4.2 (7.22 [1]). Частица массы m находится в одномерной, прямоугольной, бесконечно глубокой потенциальной яме шириной a . Найти число энергетических уровней dN на малом энергетическом интервале $(E, E + dE)$. Найти плотность состояний dN/dE . (При решении задачи не учитывать спин частицы.) Получить численную оценку плотности состояний для $a = 1$ см, $E = 1$ эВ, $m = m_e$.

Ответ:
$$\frac{dN}{dE} = \frac{a}{\pi\hbar} \sqrt{\frac{m}{2E}} \approx 8 \cdot 10^6 \text{ эВ}^{-1}.$$

Задача 6.4.3 (7.24 [1]). Найти волновые функции и энергии стационарных состояний частицы в трехмерной, прямоугольной, бесконечно глубокой потенциальной яме размером $a \times b \times c$. Положение ямы определяется условиями: $0 \leq x \leq a$, $0 \leq y \leq b$ и $0 \leq z \leq c$.

Ответ:
$$\Psi_{nmk}(x, y, z) = \frac{2^{3/2}}{\sqrt{abc}} \sin\left(\frac{\pi n}{a} x\right) \sin\left(\frac{\pi m}{b} y\right) \sin\left(\frac{\pi k}{c} z\right),$$

$$E_{nmk} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{n^2}{a^2} + \frac{m^2}{b^2} + \frac{k^2}{c^2} \right), \quad n, m, k = 1, 2, 3, \dots$$

Задача 6.4.4 (7.26 [1]). Частица массы m находится в трехмерной прямоугольной яме, ширина, длина и высота которой равны a . Найти плотность состояний dN/dE , при условии, что уровни энергии расположены густо $(dN/dE)dE \gg 1$. (При решении задачи не учитывать спин частицы.)

Ответ:
$$\frac{dN}{dE} = \frac{m^{3/2}}{\pi^2 \sqrt{2}} \left(\frac{a}{\hbar} \right)^3 \sqrt{E}.$$

Задача 6.4.5. В квантовой механике есть физические величины, не имеющие классических аналогов. В качестве примера рассмотрим физическую величину, называемую *чётностью*. Оператор чётности – это оператор инверсии \hat{P} . На произвольную одномерную функцию $f(x)$ оператор инверсии действует следующим образом: $\hat{P}f(x) = f(-x)$.

а) Покажите, что оператор чётности имеет только два собственных значения $P = \pm 1$, т.е. функция $f(x)$, обладающая определенной чётностью, может быть либо чётной, либо нечётной.

б) Покажите, что оператор чётности \hat{P} коммутирует с гамильтонианом $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x)$, если $U(-x) = U(x)$.

в) Из пункта б) следует, что волновые функции стационарных состояний частицы в симметричной относительно нуля потенциальной яме должны быть либо чётными, либо нечётными. Убедитесь в этом на примере частицы массы m в бесконечно глубокой прямоугольной яме $U(x) = \begin{cases} 0, & x \in (-L/2, L/2) \\ \infty, & x \in (-\infty, -L/2] \cup [L/2, \infty) \end{cases}$.

Покажите, что $\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \begin{cases} \cos(\pi n x / L), & n = 2k - 1 \\ \sin(\pi n x / L), & n = 2k \end{cases}, \quad k = 1, 2, 3, \dots$

Чётность стационарных состояний равна $P_n = (-1)^{n-1}$.

г) Рассмотрите частицу в нестационарном состоянии

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \Psi_n(x) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right) + \frac{1}{\sqrt{2}} \Psi_m(x) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_m t\right).$$

Покажите, что среднее значение координаты частицы равно

$$\bar{x}(t) = \frac{2L}{\pi^2} \left[\frac{(-1)^{(n+m-1)/2}}{(n+m)^2} + \frac{(-1)^{(-P_n n - P_m m - 1)/2}}{(n-m)^2} \right] \cos\left(\frac{E_n - E_m}{\hbar} t\right), \quad \text{если}$$

$P_n P_m = -1$, и $\bar{x}(t) = 0$, если $P_n P_m = 1$. Если заряженная частица совершает гармонические колебания на частоте $\omega = (E_n - E_m)/\hbar$, то она излучает электромагнитную волну той же частоты ω . Поэтому электромагнитные переходы возможны только между стационарными состояниями с различной чётностью (правило Лапорта).

д) Среднее значение чётности может быть вычислено также, как и среднее значение любой другой физической величины. Покажите, что если частица находится в нестационарном состоянии

$$\Psi(x, t) = \alpha \Psi_n(x) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right) + \beta \Psi_m(x) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_m t\right),$$

где α и β – комплексные коэффициенты, то средняя чётность

$$\text{этого состояния равна } \bar{P} = \frac{|\alpha|^2 P_n + |\beta|^2 P_m}{|\alpha|^2 + |\beta|^2}.$$

Задача 6.4.6 (7.7 [1]). Частица массы m находится в одномерной симметричной потенциальной яме глубиной U_0 и шириной L . Определить условие существования n -го стационарного состояния в таком потенциале.

Ответ:
$$\frac{2mU_0L^2}{\hbar^2} \geq \pi^2(n-1)^2.$$

Задача 6.4.7. Частица массы m находится в одномерной симметричной потенциальной яме глубиной U_0 и шириной L .

Рассмотрим случай «мелкой» ямы: $\gamma = \frac{\hbar}{L} \sqrt{\frac{2}{mU_0}} \gg 1$. В задаче 6.2.4

было показано, что в этом случае частица имеет одно стационарное состояние. Найти волновую функцию $\psi(x)$ частицы в этом состоянии и отношение вероятностей $P_{\text{in}}/P_{\text{out}}$, где P_{in} и P_{out} – вероятности обнаружить частицу внутри потенциальной ямы и за её пределами.

Ответ:
$$\psi(x) \approx \frac{1}{\gamma} \sqrt{\frac{2}{L}} \begin{cases} \left(1 - \frac{1}{\gamma^2}\right) \exp\left(\frac{2x}{\gamma^2 L}\right), & x < 0, \\ \left(1 - \frac{1}{2\gamma^2}\right) \cos\left(\frac{2x}{\gamma L} - \frac{1}{\gamma}\right), & x \in [0, L], \\ \left(1 + \frac{1}{\gamma^2}\right) \exp\left(-\frac{2x}{\gamma^2 L}\right), & x > L, \end{cases}$$

$$\frac{P_{\text{in}}}{P_{\text{out}}} \approx \frac{2}{\gamma^2} \left(1 + \frac{1}{\gamma^2}\right) \ll 1.$$

Задача 6.4.8 (7.15 [1]). Частица массы m в одномерной прямоугольной яме конечной глубины с бесконечно высокой стенкой (см. задачу 6.2.5) занимает единственный, слабо связанный уровень. Среднее значение координаты частицы $\bar{x} = \alpha L$

много больше ширины ямы L ($\alpha \gg 1$). Оцените энергию связи частицы $E_{\text{св}}$.

$$\text{Ответ: } E_{\text{св}} \approx \frac{\hbar^2}{8m\alpha^2 L^2}.$$

Задача 6.4.9. Рассмотрим простейшую одномерную модель дейтрона. Будем считать, что потенциал протон-нейтронного взаимодействия имеет вид прямоугольной потенциальной ямы с одной бесконечно высокой стенкой (как в задаче 6.2.5). При этом $m = M_p/2$ – приведенная масса системы протон-нейтрон, $U_0 = 42$ МэВ, $L = 1.9 \cdot 10^{-15}$ м. Найти энергию связи $E_{\text{св}}$ дейтрона в этой модели.

$$\text{Ответ: } E_{\text{св}} \approx 3 \text{ МэВ}.$$

Задача 6.4.10. Рассмотрим простейшую модель электронной подсистемы молекулярного иона водорода. Будем считать, что электрон находится в одномерной прямоугольной потенциальной яме с двумя симметричными минимумами:

$$U(x) = \begin{cases} U_0, & x \in \left(-\frac{b}{2}, \frac{b}{2}\right), \\ 0, & x \in \left(-a - \frac{b}{2}, -\frac{b}{2}\right] \cup \left[\frac{b}{2}, a + \frac{b}{2}\right), \\ \infty & x \in (-\infty, -a) \cup [a, \infty). \end{cases}$$

Другими словами, две прямоугольные ямы ширины a (моделирующие протоны) разделены прямоугольным барьером ширины b и высоты $U_0 > 0$ (моделирующим кулоновский барьер). Считая, что $2mU_0a^2/\hbar^2 \gg 1$ и $2mU_0b^2/\hbar^2 \gg 1$, определить уровни энергии двух нижних стационарных состояний.

$$\text{Ответ: } E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \left(1 - \frac{2}{\sqrt{R^2 - \pi^2}} - \frac{4 \exp\left[-\sqrt{R^2 - \pi^2} b/a\right]}{\sqrt{R^2 - \pi^2}} \right),$$

$$E_2 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \left(1 - \frac{2}{\sqrt{R^2 - \pi^2}} + \frac{4 \exp\left[-\sqrt{R^2 - \pi^2} b/a\right]}{\sqrt{R^2 - \pi^2}} \right),$$

где $R = \frac{a}{\hbar} \sqrt{2mU_0}$.

Замечание. При решении задачи обратите внимание на то, что волновая функция $\psi_1(x)$, соответствующая энергии E_1 – чётная, т.е. симметрична относительно перестановки протонов, а волновая функция $\psi_2(x)$ – антисимметричная. Полученные в задаче энергии имеют вид $E_1 = E_0 - A$ и $E_2 = E_0 + A$, где A – положительная монотонная функция расстояния b между потенциальными ямами (протонами), стремящаяся к нулю при $b \rightarrow \infty$, а E_0 – энергия электрона в изолированной потенциальной яме (в атоме водорода). Образование молекулярного иона водорода может произойти только в том случае, если при сближении протонов энергия электрона уменьшается. Для этого необходимо, чтобы волновая функция электрона была симметричной относительно перестановки протонов. Более подробное обсуждение этого вопроса можно найти в книге [2] (глава 8, §1).

Задача 6.4.11. Используя приближенный метод Вентцеля–Крамерса–Бриллюэна (ВКБ), найти энергии стационарных состояний электрона (a) в бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме ширины L и (b) в атоме водорода. Убедиться, что при $n \gg 1$ найденные методом ВКБ энергии совпадают в случае (a) с энергиями, полученными в задаче 6.2.1, а в случае (b) – с уровнями энергии, полученными в теории Бора.

Ответ: а) $E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \left(n + \frac{1}{2}\right)^2$, $E_n \approx \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2$, при $n \gg 1$;

б) $E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \left(n + \frac{1}{2}\right)^{-2}$, $E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}$, при $n \gg 1$.

Задача 6.4.12. Найти волновую функцию $\psi_0(p)$ основного состояния гармонического осциллятора в импульсном представлении.

Ответ: $\psi_0(p) = \frac{1}{(\pi m \omega \hbar)^{1/4}} \exp\left(-\frac{p^2}{2m\omega\hbar}\right)$.

Задача 6.4.13. Частица массы m находится в одномерном потенциале $U(x) = m\omega^2 x^2/2$ (гармонический осциллятор).

а) Найдите энергию E_1 и волновую функцию $\psi_1(x)$ частицы в первом возбужденном состоянии. Для этого функцию $\chi_1(\xi)$ нужно искать в виде полинома 1-го порядка, т.е. $\chi_1(\xi) = a_0 + a_1\xi$.

б) Покажите, что волновые функции $\psi_0(x)$ (см. задачу 6.2.7) и $\psi_1(x)$ ортогональны, т.е. $\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_0^*(x)\psi_1(x)dx = 0$.

в) Чему равна вероятность $P_{\text{кл}}$ обнаружить частицу в классически разрешенной области её движения, если частица находится в первом возбужденном состоянии.

г) Найти среднее значение координаты $\bar{x}(t)$ частицы, если она находится в нестационарном состоянии с волновой функцией

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_0(x) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_0 t\right) + \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_1(x) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_1 t\right).$$

Ответ: а) $E_1 = \frac{3\hbar}{2}$, $\psi_1(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} x \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right)$;

в) $P_{\text{кл}} \approx 0.89$; г) $\bar{x}(t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \cos(\omega t)$.

Задача 6.4.14. Частица массы m находится в двумерном потенциале $U(x, y) = m\omega^2(x^2 + y^2)/2$ (двумерный гармонический осциллятор). Найти уровни энергии E частицы и кратности их вырождения g . Кратностью вырождения уровня E называется число независимых состояний с энергией E .

Ответ: $E_{nm} = \hbar\omega(1 + n + m)$, где $n, m = 0, 1, 2, 3, \dots$. Кратность вырождения уровня $E_k = k\hbar\omega$, где $k = 1, 2, 3, \dots$, равна $g = k$.

Задача 6.4.15. Частица массы m находится в одномерном потенциале $U(x) = A\delta(x)$, где $A = \text{const} < 0$ (см. задачу 6.2.8). Найти: а) волновую функцию частицы $\psi(p)$ в импульсном представлении; б) среднее значение импульса \bar{p} и дисперсию D_p ; в) произведение среднеквадратичных отклонений $\delta p \delta x$.

$$\text{Ответ: а) } \psi(p) = \sqrt{\frac{2m|A|\hbar}{\pi}} \frac{m|A|}{m^2 A^2 + p^2 \hbar^2};$$

$$\text{б) } \bar{p} = 0, D_p = \frac{m^2 A^2}{\hbar^2}; \text{ в) } \delta p \delta x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}.$$

Задача 6.4.16. Найти уровни энергии стационарных состояний нерелятивистской частицы массы m в потенциале $U(x) = A \left[\delta\left(x - \frac{a}{2}\right) + \delta\left(x + \frac{a}{2}\right) \right]$, где $A = \text{const} < 0$, $m|A|a/\hbar^2 \gg 1$.

$$\text{Ответ: } E \approx -\frac{mA^2}{2\hbar^2} \left[1 \pm 2 \exp\left(-\frac{m|A|a}{\hbar^2}\right) \right], \text{ где «+» соответствует}$$

чётной волновой функции, а «-» – нечётной.

Задача 6.4.17 (8.2 [1]). Определить плотность потока вероятности \mathbf{j} для состояния $\psi(x) = A \exp(ikx) + B \exp(-ikx)$, где константы $A, B \in \mathbb{C}$, $k \in \mathbb{R}$.

$$\text{Ответ: } \mathbf{j} = \mathbf{e}_x \frac{\hbar k}{m} (|A|^2 - |B|^2).$$

Задача 6.4.18. Решить предыдущую задачу, считая k произвольным комплексным числом.

Ответ:

$$\mathbf{j}(x) = \mathbf{e}_x \frac{\hbar}{m} \left[k_1 (|A|^2 e^{-2k_2 x} - |B|^2 e^{2k_2 x}) - 2k_2 \text{Im}(AB^* e^{2ik_1 x}) \right],$$

где $k_1 = \text{Re} k$ и $k_2 = \text{Im} k$.

Задача 6.4.19. Свободная нерелятивистская частица массы m с энергией $E = U_0/2$ рассеивается на прямоугольной потенциальной

ступеньке высотой U_0 (см. задачу 6.2.10). Найти отношение вероятностей P_1/P_2 , где P_1 – вероятность обнаружить частицу в области $x < 0$ на отрезке от $x = 0$ до первого минимума плотности вероятности, а P_2 – вероятность обнаружить частицу в классически запрещенной области $x > 0$.

Ответ: $\frac{P_1}{P_2} = 1 + \frac{3\pi}{2}$.

Задача 6.4.20. Решить задачу 6.2.13, при условии, что частица движется из плюс бесконечности в отрицательном направлении оси x . Показать, что коэффициенты прохождения T и отражения R частицы такие же, как и в задаче 6.2.13.

Задача 6.4.21. Пусть потенциальная энергия частицы $U(x)$ имеет конечные пределы при $x \rightarrow \pm\infty$: $U(x \rightarrow \infty) = U_+$ и $U(x \rightarrow -\infty) = U_-$. Полная энергия частицы $E > U_{\pm}$. Показать, что коэффициенты отражения R и прохождения T через потенциальный барьер не зависят от направления движения частицы.

Замечание. Доказательство этого утверждения можно найти, например, в книге [3], §25.

Задача 6.4.22. Свободная нерелятивистская частица массы m с энергией $E = U_0 > 0$ движется из минус бесконечности в положительном направлении оси x . Найти коэффициент прохождения T , если потенциальная энергия частицы представляет собой систему из двух прямоугольных барьеров высоты U_0 и ширины a , расстояние между которыми b ($U(x) = U_0$ при $x \in (0, a) \cup (a + b, 2a + b)$ и $U(x) = 0$ во всех остальных точках оси x).

Ответ:

$$T = \left\{ \left[1 + \frac{k^2 a^2}{4} (1 - \cos(2kb)) \right]^2 + \left[ka + \frac{k^2 a^2}{4} \sin(2kb) \right]^2 \right\}^{-1}$$

, где $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$.

Задача 6.4.23. Свободная нерелятивистская частица массы m с энергией $E > 0$ движется из минус бесконечности в положительном направлении оси x . Найти коэффициент отражения R от потенциального барьера $U(x) = A\delta(x)$, где $A = \text{const} > 0$. Убедиться, что $T + R = 1$ (коэффициент прохождения T был найден в задаче 6.2.14).

Ответ:
$$R = \frac{mA^2}{2\hbar^2 E + mA^2}.$$

Замечание. Коэффициент отражения частицы R от дельта-образного потенциала, очевидно, не зависит от знака константы A .

Задача 6.4.24. Свободная нерелятивистская частица массы m с энергией $E > U_0 > 0$ движется из минус бесконечности в положительном направлении оси x . Найти коэффициент прохождения T через потенциальный барьер $U(x) = A\delta(x) + V(x)$, где $A = \text{const} > 0$, а $V(x) = 0$ при $x < 0$ и $V(x) = U_0$ при $x > 0$.

Ответ:
$$T = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2 + 4q^2}, \quad \text{где } q = \frac{mA}{\hbar^2}, \quad k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad \text{и}$$

$$k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar}.$$

Задача 6.4.25. Свободная нерелятивистская частица массы m с энергией $E > 0$ движется из минус бесконечности в положительном направлении оси x . Найти коэффициент прохождения T через потенциальный барьер $U(x) = A[\delta(x) + \delta(x - a)]$.

Ответ:
$$T = \left\{ \left[1 + \frac{q^2}{k^2} (\cos(2ka) - 1) \right]^2 + \left[\frac{2q}{k} + \frac{q^2}{k^2} \sin(2ka) \right]^2 \right\}^{-1},$$

где $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ и $q = \frac{mA}{\hbar^2}$.

Задача 6.4.26. Рассматривая рассеяние нерелятивистской частицы массы m с энергией $E > 0$ на потенциале $U(x) = 0$ при

$x \in (-\infty, 0) \cup (L, \infty)$ и $U(x) = -|U_0|$, при $x \in (0, L)$, найти энергию стационарного состояния частицы в этом потенциале. При решении задачи считать, что $mL^2|U_0| \ll 2\hbar^2$.

Ответ: $E = -\frac{mL^2}{2\hbar^2}U_0^2$.

Задача 6.4.27. Определить коэффициент прохождения T нерелятивистской частицы массы m через потенциальный барьер $U(x) = U_0 - \alpha x^2$ ($0 < E \ll U_0$, $\alpha > 0$). Вычислить только экспоненциальный множитель.

Ответ: $T = T_0 \exp\left[-\frac{\pi}{\hbar}(U_0 - E)\sqrt{\frac{2m}{\alpha}}\right]$.

Задача 6.4.28. Определить коэффициент прохождения T_n нерелятивистской частицы массы m через потенциальный барьер в виде лестницы из n одинаковых ступенек

$$U(x) = \begin{cases} U_0 - (n-1)(E - U_0), & x \in [0, L/n] \\ U_0 - (n-2)(E - U_0), & x \in [L/n, 2L/n] \\ \dots \\ U_0 - (E - U_0), & x \in [(n-2)L/n, (n-1)L/n] \\ U_0, & x \in [(n-1)L/n, L] \end{cases}$$

E – энергия частицы ($0 < E \ll U_0$). Вычислить только экспоненциальный множитель. Что будет, если $n \gg 1$?

Ответ: $T_n = T_{0n} \exp\left[-\frac{2L}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - E)} \cdot n^{-3/2} \sum_{k=1}^n \sqrt{k}\right]$,
 $T_\infty = T_{0\infty} \exp\left[-\frac{4L}{3\hbar}\sqrt{2m(U_0 - E)}\right]$.

Замечание. Обратим внимание на то, что коэффициент прохождения T_∞ соответствует коэффициенту прохождения T через треугольный потенциальный барьер, который был найден в задаче 6.2.16.

Задача 6.4.29. Потенциальная энергия нерелятивистской частицы массы m имеет вид: $U(x) = U_0 \cos^2\left(\frac{\pi x}{2a}\right)$, где $U_0 a^2 m \gg \hbar^2$. Считая, что частица локализована вблизи одного из минимумов потенциальной энергии и обладает при этом минимально возможной энергией, найти вероятность туннелирования частицы в соседний минимум потенциальной энергии. Вычислить только экспоненциальный множитель.

Ответ: $T = T_0 \exp\left(-\frac{8a}{\pi\hbar} \sqrt{2mU_0}\right)$.

Задача 6.4.30 (8.19 [1]). Нерелятивистская частица массы m находится в потенциальной яме, отделенной прямоугольным потенциальным барьером от области инфинитного движения:

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0, \\ 0, & x \in [0, a] \cup [a + b, \infty), \\ U_0, & x \in (a, a + b), \end{cases}$$

где $U_0 > 0$, $a > 0$ и $b > 0$, причем $2mU_0 a^2 / \hbar^2 \gg 1$ и $2mU_0 b^2 / \hbar^2 \gg 1$. Найти время жизни τ частицы в квазистационарном состоянии с минимальной энергией.

Ответ: $\tau = \frac{amU_0}{8E_0 \sqrt{2mE_0}} \exp\left(\frac{2b}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E_0)}\right)$, где

$$E_0 \approx \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}.$$

Задача 6.4.31. Нерелятивистская частица массы m находится в поле с потенциалом $U(x) = A \left[\delta\left(x + \frac{a}{2}\right) + \delta\left(x - \frac{a}{2}\right) \right]$, где A – положительная константа, причем $Ama \gg \hbar^2$. В начальный момент времени частица локализована вблизи начала координат. Найти уровни энергии квазистационарных состояний и их времена жизни.

$$\text{Ответ: } E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2} \left[1 + \frac{2\hbar^2}{Ama} (-1)^n \right], \quad \tau_n = \frac{A^2 m^3 a^4}{\pi^3 \hbar^5} \frac{1}{n^3}, \text{ где}$$

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

Список литературы

1. Сборник задач по атомной физике. Под ред. С.С. Красильникова, А.М. Попова, О.В. Тихоновой. – М.: Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, 2010. – 217 с.
2. Фейнман Р., Лейтон Р., Сэндс М. Фейнмановские лекции по физике. Вып. 8,9: Квантовая механика. – М.: УРСС: Книжный дом «ЛИБРОКОМ», 2013. – 528 с.
3. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика: Учеб. Пособие для вузов. В 10 т. Т. III. Квантовая механика (нерелятивистская теория). – М.: Наука, 1989. – 768 с.

ГЛАВА 7 СПИН ЭЛЕКТРОНА

7.1. Теоретический материал

1. Спин. *Спин* – это момент импульса частицы, не связанный с её движением. Операторы проекции спина \hat{s}_i , где $i = x, y, z$, удовлетворяют таким же коммутационным соотношениям, что и операторы проекций обычного (орбитального) момента импульса

$$[\hat{s}_i, \hat{s}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{s}_k \quad \text{и} \quad [\hat{s}^2, \hat{s}_i] = 0,$$

а собственные значения операторов \hat{s}^2 и \hat{s}_z равны соответственно

$$s^2 = \hbar^2 s(s+1) \quad \text{и} \quad s_z = -s\hbar, -(s-1)\hbar, \dots, (s-1)\hbar, s\hbar,$$

где s – спиновое квантовое число. В отличие от орбитального квантового числа l , спиновое квантовое число не обязано быть целым. Однако число проекций спина на ось z , как и в случае орбитального момента, равно $(2s+1)$ и, очевидно, обязано быть целым. Отсюда следует, что спиновое квантовое число может принимать либо целые значения $s = 0, 1, 2, \dots$, либо полуцелые $s = 1/2, 3/2, 5/2, \dots$. Частицы с полуцелым спиновым квантовым числом называются *фермионами*, с целым – *бозонами*.

Поскольку большая часть окружающей нас материи состоит из частиц с $s = 1/2$ (электроны, протоны, нейтроны), остановимся на этом случае более подробно. Проекция спина на ось z может принимать два значения $s_z = \pm \hbar/2$, поэтому в нерелятивистском приближении волновую функцию частицы можно представить в виде столбца из двух функций:

$$\Psi(\mathbf{r}, s_z) = \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r}) \\ \psi_2(\mathbf{r}) \end{pmatrix}.$$

Такую волновую функцию можно представить в виде суперпозиции функций вида $\Psi(\mathbf{r}, s_z) = \Psi(\mathbf{r})\chi(s_z)$, где $\chi(s_z) = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}$,

причем $|a_1|^2 + |a_2|^2 = 1$.

Операторы проекций спина равны

$$\hat{s}_i = \frac{\hbar}{2} \sigma_i,$$

где σ_i – матрицы Паули:

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

Из определения матриц Паули видно, что они эрмитовы: $\sigma_i^\dagger = \sigma_i$. Кроме того, используя явный вид матриц Паули можно доказать следующее их свойство:

$$\sigma_i \sigma_j = i \varepsilon_{ijk} \sigma_k + \delta_{ij} I,$$

где $I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ – единичная матрица.

2. Магнитный момент. *Магнитный момент* электрона связан с его спиновым моментом соотношением:

$$\hat{\mu} = -g \mu_B \frac{\hat{\mathbf{s}}}{\hbar},$$

где $\mu_B = \frac{|q_e| \hbar}{2m_e} = 9.27 \cdot 10^{-24}$ Дж/Тл – магнетон Бора, а g – гиромагнитный множитель (g -фактор). Для случая спинового магнетизма $g = 2$, откуда $\hat{\mu} = -\mu_B \boldsymbol{\sigma}$. Добавка в гамильтониан, связанная с наличием внешнего магнитного поля, равна

$$\hat{H} = -(\hat{\mu} \mathbf{B}) = \mu_B (\boldsymbol{\sigma} \mathbf{B}).$$

3. Опыт Штерна-Герлаха. Впервые квантование момента импульса экспериментально наблюдали Штерн и Герлах в 1922 г. Если в неоднородное магнитное поле попадает пучок частиц с отличными от нуля моментами импульса, то этот пучок разделяется на несколько пучков. Будем для простоты обсуждать пучок атомов со спином $1/2$ *. Он будет расщепляться на два пучка с проекциями спинов $\pm \hbar/2$ на направление вектора магнитной индукции \mathbf{B} . Экспериментальную установку Штерна и Герлаха

* На заряженную частицу в магнитном поле действует сила Лоренца. Поэтому в экспериментах Штерна–Герлаха использовались пучки нейтральных атомов. В задачах этой главы мы будем рассматривать только спиновое состояние электронов, отвлекаясь от их движения в пространстве, т.е. будем считать, что электроны находятся внутри нейтральных атомов, причем имеют нулевой орбитальный момент импульса.

можно схематически изобразить так, как показано на рис. 7.1а. Для краткости мы будем называть её прибором Штерна–Герлаха. Если один из атомных пучков перекрыть, то из прибора Штерна–Герлаха будут вылетать атомы только с одной проекцией спина, например, $+\hbar/2$. Такой прибор Штерна–Герлаха будем называть «усовершенствованным» (см. рис. 7.1б,в). При решении задач будем считать, что после прохождения через прибор Штерна–Герлаха атомы не меняют направления движения.

7.2. Задачи с решениями

Задача 7.2.1. Используя свойства матриц Паули показать, что для операторов проекций спина выполняются коммутационные соотношения

$$[\hat{s}_i, \hat{s}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{s}_k \text{ и } [\hat{s}^2, \hat{s}_i] = 0.$$

Решение

Используя определения операторов проекций спина $\hat{s}_i = \frac{\hbar}{2} \sigma_i$ и свойство матриц Паули $\sigma_i \sigma_j = i\varepsilon_{ijk} \sigma_k + \delta_{ij} I$, докажем первое коммутационное соотношение:

$$[\hat{s}_i, \hat{s}_j] = \hat{s}_i \hat{s}_j - \hat{s}_j \hat{s}_i = \frac{\hbar^2}{4} (\sigma_i \sigma_j - \sigma_j \sigma_i) = i\hbar \frac{1}{2} (\varepsilon_{ijk} - \varepsilon_{jik}) \frac{\hbar}{2} \sigma_k = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{s}_k.$$

Для доказательства второго коммутационного соотношения заметим, что из свойства матриц Паули $\sigma_i \sigma_j = i\varepsilon_{ijk} \sigma_k + \delta_{ij} I$ следует, что $\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = I$. Поэтому оператор

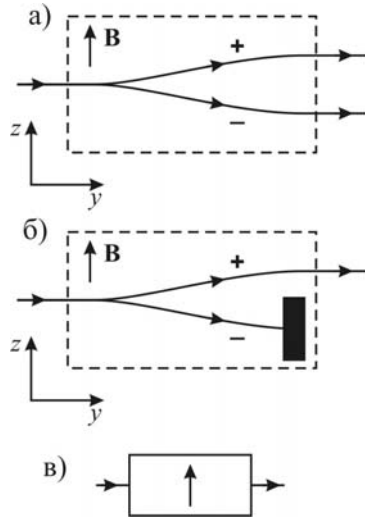


Рис. 7.1. Схематическое изображение а) обычного и б) «усовершенствованного» прибора Штерна–Герлаха. В задачах «усовершенствованный» прибор Штерна–Герлаха будем обозначать так, как показано на рис. в).

$$\hat{s}^2 = \hat{s}_x^2 + \hat{s}_y^2 + \hat{s}_z^2 = \frac{\hbar^2}{4} (\sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2) = \frac{3\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

коммутирует с любой матрицей размером два на два. Отсюда $[\hat{s}^2, \hat{s}_i] = 0$.

Задача 7.2.2. Найти собственные значения и собственные векторы оператора проекции спина \hat{s}_z .

Решение

Задача на собственные значения оператора \hat{s}_z имеет вид:

$$\hat{s}_z \chi = s_z \chi,$$

где $\hat{s}_z = \frac{\hbar}{2} \sigma_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$, а столбец $\chi = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}$ нормирован условием

$|a_1|^2 + |a_2|^2 = 1$. Тогда

$$\begin{pmatrix} \frac{\hbar}{2} - s_z & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar}{2} - s_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (7.1)$$

Собственные значения s_z находятся из условия:

$$\det \begin{pmatrix} \frac{\hbar}{2} - s_z & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar}{2} - s_z \end{pmatrix} = 0,$$

откуда $s_z = \pm \frac{\hbar}{2}$. Найдем теперь собственные векторы χ^\pm ,

соответствующие собственным значениям $s_z = \pm \frac{\hbar}{2}$. Из (7.1) при

$s_z = +\frac{\hbar}{2}$ получаем:

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -\hbar \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

откуда $a_2 = 0$. Из условия нормировки $|a_1|^2 + |a_2|^2 = 1$ следует, что $a_1 = e^{i\alpha}$, где α – вещественная константа. Выбирая $\alpha = 0$, получим $\chi^+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$. Аналогично находим $\chi^- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$.

Замечание. Обратим внимание на то, что векторы χ^\pm ортонормированы:

$$\left(\chi^+\right)^+ \chi^+ = 1, \quad \left(\chi^-\right)^+ \chi^- = 1, \quad \left(\chi^+\right)^+ \chi^- = 0.$$

В силу того, что оператор \hat{s}_z коммутирует с оператором квадрата спина \hat{s}^2 , векторы χ^\pm также являются собственными векторами оператора \hat{s}^2 . Действительно, оператор \hat{s}^2 имеет вид:

$$\hat{s}^2 = \hat{s}_x^2 + \hat{s}_y^2 + \hat{s}_z^2 = \frac{\hbar^2}{4} (\sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2) = \frac{3\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Поэтому $\hat{s}^2 \chi^\pm = \hbar^2 s(s+1) \chi^\pm = (3\hbar^2/4) \chi^\pm$, откуда $s = 1/2$.

Ответ: $s_z = \pm \frac{\hbar}{2}$, $\chi^+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $\chi^- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$.

Задача 7.2.3. Найти расщепление ΔE уровней энергии электрона в однородном стационарном магнитном поле \mathbf{B} .

Решение

Будем отсчитывать энергию электрона от его энергии в отсутствие магнитного поля. Направим ось z вдоль вектора магнитной индукции \mathbf{B} . Тогда спиновая часть волновой функции χ будет удовлетворять уравнению Шредингера:

$$i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} = \mu_B (\boldsymbol{\sigma} \mathbf{B}) \chi = \mu_B B \sigma_z \chi. \quad (7.2)$$

Спиновую часть волновой функции χ можно представить как суперпозицию векторов χ^\pm :

$$\chi(t) = a_1(t) \chi^+ + a_2(t) \chi^- = \begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \end{pmatrix}, \quad (7.3)$$

где $a_1(t)$ и $a_2(t)$ – амплитуды вероятности обнаружить электрон в состояниях с проекцией спина $s_z = +\hbar/2$ и $s_z = -\hbar/2$

соответственно. Амплитуды вероятности $a_1(t)$ и $a_2(t)$ нормированы условием $|a_1(t)|^2 + |a_2(t)|^2 = 1$. Подставляя (7.3) в уравнение (7.2), получим систему из двух уравнений:

$$i\hbar \frac{\partial a_1(t)}{\partial t} = \mu_B B a_1(t), \quad (7.4a)$$

$$i\hbar \frac{\partial a_2(t)}{\partial t} = -\mu_B B a_2(t). \quad (7.4b)$$

Решение этой системы уравнений будем искать в виде:

$$a_k(t) = a_{0k} \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right), \quad (7.5)$$

где не зависящие от времени коэффициенты a_{01} и a_{02} нормированы условием $|a_{01}|^2 + |a_{02}|^2 = 1$. Подставляя (7.5) в (7.4a) и (7.4b), получим систему из двух алгебраических уравнений:

$$Ea_{01} = \mu_B B a_{01},$$

$$Ea_{02} = -\mu_B B a_{02}.$$

Решение этой системы очевидно: либо $E = \mu_B B$ и $a_{02} = 0$ (тогда из условия нормировки следует, что $|a_{01}| = 1$, поэтому можно выбрать $a_{01} = 1$); либо $E = -\mu_B B$ и $a_{01} = 0$, $a_{02} = 1$.

Таким образом, энергия электрона увеличивается на величину $\mu_B B$, если проекция спина на направление магнитного поля положительна ($s_z = +\hbar/2$), и уменьшается на величину $\mu_B B$, если $s_z = -\hbar/2$. Т.е. в магнитном поле происходит расщепление уровня энергии электрона на величину $\Delta E = 2\mu_B B$.

Ответ: $\Delta E = 2\mu_B B$.

Задача 7.2.4. Рассмотрим электрон во внешнем нестационарном магнитном поле $\mathbf{V}(t)$, направленном вдоль оси z . Показать, что вероятности обнаружения электрона с проекциями спина $s_z = \pm \frac{\hbar}{2}$ не зависят от времени.

Решение

По условию задачи вектор магнитной индукции направлен вдоль оси z : $\mathbf{V}(t) = \{0, 0, B(t)\}$. Поэтому для амплитуд вероятности

обнаружить электрон в состояниях с проекцией спина $s_z = +\hbar/2$ и $s_z = -\hbar/2$ получаем систему уравнений, аналогичную (7.4a) и (7.4б):

$$i\hbar \frac{\partial a_1(t)}{\partial t} = \mu_B B(t) a_1(t), \quad (7.6a)$$

$$i\hbar \frac{\partial a_2(t)}{\partial t} = -\mu_B B(t) a_2(t). \quad (7.6б)$$

Однако теперь искать решение с определенной энергией E мы не можем. Вместо этого найдем решения каждого из этих двух уравнений по отдельности. Рассмотрим подробнее уравнение (7.6a). Переменные в нем легко разделяются:

$$\frac{da_1}{a_1} = -i \frac{\mu_B B(t)}{\hbar} dt.$$

После интегрирования этого уравнения получим:

$$a_1(t) = a_{01} \exp\left(-i \frac{\mu_B}{\hbar} \int_0^t B(\tau) d\tau\right).$$

Аналогично, из уравнения (7.6б) следует

$$a_2(t) = a_{02} \exp\left(i \frac{\mu_B}{\hbar} \int_0^t B(\tau) d\tau\right).$$

Здесь a_{01} и a_{02} – амплитуды вероятности обнаружить электрон в начальный момент времени ($t = 0$) в состояниях с проекцией спина $s_z = +\hbar/2$ и $s_z = -\hbar/2$ соответственно.

Таким образом, вероятность обнаружить электрон с определенной проекцией спина на ось z остается постоянной и не зависит от изменения индукции магнитного поля $\mathbf{B}(t) = \{0, 0, B(t)\}$

во времени:

$$P^+ = |a_1(t)|^2 = |a_{01}|^2 = \text{const} \quad \text{и}$$

$$P^- = |a_2(t)|^2 = |a_{02}|^2 = \text{const}.$$

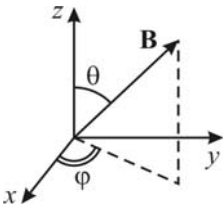


Рис. 7.2. Направление поля \mathbf{B} определяется углами θ и φ .

Задача 7.2.5. Электрон находится в однородном стационарном магнитном поле \mathbf{B} , направление которого не совпадает с направлением оси z :

$$\mathbf{B} = \{B \cos \varphi \sin \theta, B \sin \varphi \sin \theta, B \cos \theta\},$$

углы φ и θ показаны на рис. 7.2. Найти амплитуды вероятности обнаружить электрон в состояниях χ^\pm .

Решение

Решение этой задачи во многом аналогично решению задачи 7.2.3. Спиновую часть волновой функции электрона χ запишем в виде:

$$\chi(t) = a_1(t)\chi^+ + a_2(t)\chi^- = \begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \end{pmatrix},$$

где $a_1(t)$ и $a_2(t)$ – амплитуды вероятности обнаружить электрон в состояниях χ^\pm , которые нам нужно найти, причем $|a_1(t)|^2 + |a_2(t)|^2 = 1$. Функция $\chi(t)$ должна быть решением нестационарного уравнения Шредингера:

$$i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} = \mu_B (\boldsymbol{\sigma} \mathbf{B}) \chi = \mu_B (\sigma_x B_x + \sigma_y B_y + \sigma_z B_z) \chi,$$

которое эквивалентно системе из двух уравнений:

$$i\hbar \frac{\partial a_1(t)}{\partial t} = \mu_B B_z a_1(t) + \mu_B (B_x - iB_y) a_2(t) \equiv H_{11} a_1(t) + H_{12} a_2(t), \quad (7.7a)$$

$$i\hbar \frac{\partial a_2(t)}{\partial t} = -\mu_B B_z a_2(t) + \mu_B (B_x + iB_y) a_1(t) \equiv H_{21} a_1(t) + H_{22} a_2(t). \quad (7.7b)$$

Решение этой системы уравнений ищем в виде:

$$a_k(t) = a_{0k} \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right), \quad (7.8)$$

где не зависящие от времени коэффициенты a_{01} и a_{02} нормированы условием $|a_{01}|^2 + |a_{02}|^2 = 1$. Подставляя (7.8) в (7.7a) и (7.7b), получим систему из двух линейных алгебраических уравнений, которую удобнее записать в матричном виде:

$$\begin{pmatrix} H_{11} - E & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{01} \\ a_{02} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (7.9)$$

При произвольных значениях энергии E однородная система линейных уравнений (7.9) имеет тривиальное решение $a_{01} = a_{02} = 0$,

которое противоречит условию нормировки $|a_{01}|^2 + |a_{02}|^2 = 1$. Для того, чтобы система уравнений (7.9) имела нетривиальное решение, необходимо выполнение условия:

$$\det \begin{vmatrix} H_{11} - E & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} - E \end{vmatrix} = 0,$$

из которого следует квадратное уравнение относительно E :

$$E^2 - E(H_{11} + H_{22}) + (H_{11}H_{22} - H_{12}H_{21}) = 0. \quad (7.10)$$

Выражая коэффициенты H_{11} , H_{12} , H_{21} и H_{22} через B_x , B_y и B_z , преобразуем (7.10) к виду:

$$E^2 = \mu_B^2 B^2,$$

где $B^2 = B_x^2 + B_y^2 + B_z^2$. Решение этого уравнения $E = \pm \mu_B B$ совпадает с результатом, полученным в задаче 7.2.3. Это не удивительно, поскольку расщепление уровней энергии, очевидно, не зависит от выбора системы координат, которая используется для решения задачи. Энергия $E = +\mu_B B$ соответствует направлению спина вдоль поля \mathbf{B} (т.е. проекция спина на направление вектора \mathbf{B} равна $\hbar/2$), а энергия $E = -\mu_B B$ — направлению спина против поля.

Для определенности будем считать, что спин электрона направлен по полю \mathbf{B} . Тогда, подставляя $E = +\mu_B B$ в (7.9), получим уравнение

$$(H_{11} - \mu_B B)a_{01} + H_{12}a_{02} = 0,$$

откуда

$$\frac{a_{01}}{a_{02}} = \frac{H_{12}}{\mu_B B - H_{11}} = \frac{B_x - iB_y}{B - B_z} = \frac{\sin \theta (\cos \varphi - i \sin \varphi)}{1 - \cos \theta} = \frac{\cos \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi}}{\sin \frac{\theta}{2}}.$$

Последнее соотношение и условие нормировки $|a_{01}|^2 + |a_{02}|^2 = 1$ позволяют определить коэффициенты a_{01} и a_{02} с точностью до постоянной фазы. Выбирая её так, чтобы a_{01} и a_{02} были симметричны относительно угла φ , окончательно получим:

$$a_{01} = \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi/2} \equiv \langle +z | \theta, \varphi \rangle, \quad (7.11a)$$

$$a_{02} = \sin \frac{\theta}{2} e^{i\varphi/2} \equiv \langle -z | \theta, \varphi \rangle, \quad (7.11б)$$

где для большей ясности введены дираковские обозначения амплитуд вероятности: $\langle \pm z | \theta, \varphi \rangle$ – амплитуда вероятности обнаружить электрон с проекцией спина $\pm \hbar/2$ на ось z , если до измерения проекция его спина на ось $\mathbf{n} = \{\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta\}$ была равна $\hbar/2$. Требование симметрии амплитуд вероятности a_{01} и a_{02} относительно угла φ связано с тем, что при изменении направления оси z ($z \rightarrow -z$, при этом $\varphi \rightarrow -\varphi$ и $\theta \rightarrow \pi - \theta$) амплитуды вероятности a_{01} и a_{02} должны переходить друг в друга ($a_{01} \rightarrow a_{02}$ и $a_{02} \rightarrow a_{01}$).

Замечания

1. Полученный результат особенно важен. Формулы (7.11а) и (7.11б) показывают, каким образом амплитуды вероятностей обнаружить частицу с определенной проекцией спина преобразуются при повороте системы координат.

Например, можно легко ответить на следующий вопрос. Известно, что проекция спина электрона на ось z равна $\hbar/2$. Какова вероятность обнаружить электрон с проекцией $\hbar/2$ на ось x ? Сначала вычислим амплитуду вероятности:

$$\langle +x | +z \rangle = \langle +z | +x \rangle^* \equiv \langle +z | \theta = \pi/2, \varphi = 0 \rangle^* = \frac{1}{\sqrt{2}},$$

откуда искомая вероятность равна $|\langle +x | +z \rangle|^2 = 1/2$. Другими словами, если спин электрона направлен «вверх», то с вероятностью $1/2$ он может быть направлен «вбок».

2. Столбец $\begin{pmatrix} a_{01} \\ a_{02} \end{pmatrix}$, составленный из амплитуд вероятности, не

является вектором. Это видно хотя бы из того, что поворот системы координат на угол 2π относительно оси z ($\varphi \rightarrow \varphi + 2\pi$)

приводит к преобразованию: $\begin{pmatrix} a_{01} \\ a_{02} \end{pmatrix} \rightarrow -\begin{pmatrix} a_{01} \\ a_{02} \end{pmatrix}$. Столбец $\begin{pmatrix} a_{01} \\ a_{02} \end{pmatrix}$,

преобразующийся при повороте системы координат по найденному в задаче закону (формулы (7.11а) и (7.11б)), называется *спинором*.

3. Для вывода формул (7.11а) и (7.11б) вовсе не обязательно наличие внешнего магнитного поля. При решении задачи оно играло вспомогательную роль. Аналогичный результат может быть получен, например, с помощью мысленных экспериментов с приборами Штерна-Герлаха (см. главу 4 книги [1]).

Ответ: $\langle +z | \theta, \varphi \rangle = \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi/2}$, $\langle -z | \theta, \varphi \rangle = \sin \frac{\theta}{2} e^{i\varphi/2}$.

Задача 7.2.6. Электрон находится в однородном стационарном магнитном поле \mathbf{B} , направление которого совпадает с направлением оси z : $\mathbf{B} = \{0, 0, B\}$. В начальный момент времени $t = 0$ спин электрона направлен вдоль оси x , т.е. проекция спина на ось x равна $\hbar/2$. Какова вероятность $P_{+x}(t)$ обнаружить электрон со спином, сонаправленным с осью x в момент времени t ? Показать, что спин прецессирует вокруг оси z . Найти частоту прецессии ω .

Решение

Разложим спиновую часть волновой функции электрона $\chi(t)$ по собственным функциям оператора \hat{s}_z :

$$\chi(t) = a_1(t)\chi^+ + a_2(t)\chi^- = \begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \end{pmatrix},$$

где $a_1(t)$ и $a_2(t)$ – амплитуды вероятности обнаружить электрон в состояниях χ^\pm , которые, согласно результатам решения задач 7.2.3 и 7.2.5, равны

$$a_1(t) = \langle +z | +x \rangle \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mu_B B t\right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mu_B B t\right), \quad (7.12a)$$

$$a_2(t) = \langle -z | +x \rangle \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mu_B B t\right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mu_B B t\right). \quad (7.12б)$$

При записи выражений (7.12а) и (7.12б) учтено, что по условию задачи в начальный момент времени $t = 0$ спин электрона направлен вдоль оси x . Тогда амплитуда вероятности обнаружения электрона со спином, направленным вдоль оси x в момент времени t , равна

$$\langle +x | \chi(t) \rangle = \langle +x | +z \rangle a_1(t) + \langle +x | -z \rangle a_2(t) =$$

$$= \langle +z | +x \rangle^* a_1(t) + \langle -z | +x \rangle^* a_2(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} (a_1(t) + a_2(t)). \quad (7.13)$$

Подставляя в (7.13) выражения (7.12а) и (7.12б), получим:

$$\langle +x | \chi(t) \rangle = \frac{1}{2} \left[\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mu_B B t\right) + \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mu_B B t\right) \right] = \cos\left(\frac{\mu_B B}{\hbar} t\right),$$

откуда вероятность обнаружить электрон со спином ориентированным вдоль оси x в момент времени t , равна

$$P_{+x}(t) = |\langle +x | \chi(t) \rangle|^2 = \cos^2\left(\frac{\mu_B B}{\hbar} t\right) = \frac{1}{2} \left[1 + \cos\left(\frac{2\mu_B B}{\hbar} t\right) \right].$$

Видно, что вероятность $P_{+x}(t)$ периодически изменяется от 0 до 1 с частотой $\omega = 2\mu_B B / \hbar$.

Покажем, что такое поведение вероятности $P_{+x}(t)$ является следствием прецессии спина электрона вокруг оси z . Для этого вычислим амплитуду вероятности обнаружить электрон со спином ориентированным вдоль единичного вектора $\mathbf{n}(t) = \{\cos \omega t, \sin \omega t, 0\}$, вращающимся в плоскости xy с частотой ω . В начальный момент времени $t=0$ вектор \mathbf{n} направлен параллельно оси x . Используя формулы (7.11а) и (7.11б), получим следующее выражение для интересующей нас амплитуды вероятности:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{n}(t) | \chi(t) \rangle &= \langle \mathbf{n}(t) | +z \rangle a_1(t) + \langle \mathbf{n}(t) | -z \rangle a_2(t) = \\ &= \langle +z | \theta = \pi/2, \varphi = \omega t \rangle^* a_1(t) + \langle -z | \theta = \pi/2, \varphi = \omega t \rangle^* a_2(t) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\omega t/2} a_1(t) + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\omega t/2} a_2(t), \quad (7.14) \end{aligned}$$

где амплитуды вероятности $a_1(t)$ и $a_2(t)$ такие же, как в (7.12а) и (7.12б). Подставляя их в выражение (7.14), найдем:

$$\langle \mathbf{n}(t) | \chi(t) \rangle = \cos \left[\left(\frac{\mu_B B}{\hbar} - \frac{\omega}{2} \right) t \right].$$

Видно, что если частота вращения единичного вектора $\mathbf{n}(t)$ равна $\omega = 2\mu_B B / \hbar$, то $\langle \mathbf{n}(t) | \chi(t) \rangle = 1$. Это означает, что в любой момент времени t проекция спина на вектор $\mathbf{n}(t)$ равна $\hbar/2$. В этом смысле спин электрона сонаправлен с $\mathbf{n}(t)$, т.е. вращается (прецессирует) в плоскости xy с частотой

$$\boldsymbol{\omega} = \frac{2\mu_B \mathbf{B}}{\hbar} = \frac{|g_e|}{m_e} \mathbf{B}. \quad (7.15)$$

Замечание. Полученная нами формула (7.15) совпадает с известной из курса классической физики теоремой Лармора. Действительно, если рассматривать спин электрона как классический вектор момента импульса, то

$$[\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{s}] = \mathbf{M}, \quad (7.16)$$

где $\mathbf{M} = [\boldsymbol{\mu} \times \mathbf{B}]$ – момент силы, действующей на магнитный момент во внешнем магнитном поле, а $\boldsymbol{\omega}$ – частота прецессии. Подставляя в (7.16) магнитный момент электрона в виде $\boldsymbol{\mu} = -2\mu_B \mathbf{s}/\hbar$, получим:

$$[\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{s}] = \frac{2\mu_B}{\hbar} [\mathbf{B} \times \mathbf{s}],$$

откуда $\boldsymbol{\omega} = 2\mu_B \mathbf{B}/\hbar$.

Ответ: $P_{+x}(t) = \frac{1}{2} \left[1 + \cos \left(\frac{2\mu_B B}{\hbar} t \right) \right]$, $\boldsymbol{\omega} = \frac{|g_e|}{m_e} \mathbf{B}$.

Задача 7.2.7. Электрон находится в однородном стационарном магнитном поле $\mathbf{B}_0 = B_0 \mathbf{e}_z$. В направлении, перпендикулярном \mathbf{B}_0 , приложено слабое осциллирующее поле $\mathbf{B} = B \mathbf{e}_x \cos \omega t$, $B \ll B_0$. В начальный момент времени $t=0$ спин электрона сонаправлен с полем \mathbf{B}_0 . Определить вероятность P того, что в момент времени $t=T$ спин электрона будет направлен против поля \mathbf{B}_0 .

Решение

Спиновую часть волновой функции электрона χ запишем в виде:

$$\chi(t) = a_1(t) \chi^+ + a_2(t) \chi^- = \begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \end{pmatrix}, \quad (7.17)$$

где $a_1(t)$ и $a_2(t)$ – амплитуды вероятности обнаружить электрон в состояниях χ^\pm . Согласно условию задачи,

$$a_1(0) = 1 \quad \text{и} \quad a_2(0) = 0.$$

Подставляя функцию (7.17) в нестационарное уравнение Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} = \mu_B (\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{B}_0 + \mathbf{B})) \chi = \mu_B (\sigma_z B_0 + \sigma_x B \cos \omega t) \chi, \quad (7.18)$$

получим систему дифференциальных уравнений:

$$i\hbar \frac{\partial a_1(t)}{\partial t} = \mu_B B_0 a_1(t) + \mu_B B a_2(t) \cos \omega t,$$

$$i\hbar \frac{\partial a_2(t)}{\partial t} = -\mu_B B_0 a_2(t) + \mu_B B a_1(t) \cos \omega t.$$

Вводя обозначения $\omega_0 = 2\mu_B B_0/\hbar$ и $\gamma = \mu_B B/\hbar$, перепишем эту систему уравнений в виде:

$$i \frac{\partial a_1(t)}{\partial t} = \frac{\omega_0}{2} a_1(t) + \gamma a_2(t) \cos \omega t, \quad (7.19a)$$

$$i \frac{\partial a_2(t)}{\partial t} = -\frac{\omega_0}{2} a_2(t) + \gamma a_1(t) \cos \omega t. \quad (7.19б)$$

Решение системы уравнений (7.19a) и (7.19б) существенно упрощается, если принять во внимание условие малости переменного магнитного поля $B \ll B_0$, откуда $\omega_0 \gg \gamma$.

При $\gamma = 0$ решение легко находится (сравни с задачей 7.2.3):

$$a_1(t) = a_{01} e^{-i\omega_0 t/2} \quad \text{и} \quad a_2(t) = a_{02} e^{i\omega_0 t/2},$$

где a_{01} и a_{02} – константы нормировки, удовлетворяющие условию $|a_{01}|^2 + |a_{02}|^2 = 1$.

При $\gamma \neq 0$ будем искать решение в виде

$$a_1(t) = a_{01}(t) e^{-i\omega_0 t/2} \quad \text{и} \quad a_2(t) = a_{02}(t) e^{i\omega_0 t/2}. \quad (7.20)$$

Подставляя (7.20) в (7.19a) и (7.19б), получим систему уравнений:

$$i \frac{\partial a_{01}(t)}{\partial t} = \gamma a_{02}(t) \cos \omega t \cdot e^{i\omega_0 t}, \quad (7.21a)$$

$$i \frac{\partial a_{02}(t)}{\partial t} = \gamma a_{01}(t) \cos \omega t \cdot e^{-i\omega_0 t} \quad (7.21б)$$

с начальными условиями $a_{01}(0) = 1$, $a_{02}(0) = 0$. Используя формулу Эйлера, систему уравнений (7.21a) и (7.21б) можно переписать в более удобном виде:

$$\frac{\partial a_{01}(t)}{\partial t} = -\frac{i\gamma}{2} a_{02}(t) \left[e^{i(\omega_0 + \omega)t} + e^{i(\omega_0 - \omega)t} \right], \quad (7.22a)$$

$$\frac{\partial a_{02}(t)}{\partial t} = -\frac{i\gamma}{2} a_{01}(t) \left[e^{-i(\omega_0 - \omega)t} + e^{-i(\omega_0 + \omega)t} \right]. \quad (7.22б)$$

Далее мы увидим, что искомая вероятность P велика только при частотах $\omega \approx \omega_0$, поэтому быстро осциллирующими слагаемыми в (7.22а) и (7.22б), содержащими $\exp[\pm i(\omega_0 + \omega)t]$, можно пренебречь. Действительно, если амплитуды вероятности $a_{0k}(t)$ ($k=1,2$) мало изменяются за время $\tau = 2\pi/(\omega_0 + \omega)$, то при интегрировании уравнений (7.22а) и (7.22б) интегралы от функций $a_{0k}(t) \exp[\pm i(\omega_0 + \omega)t]$ по целому числу периодов τ будут близки к нулю. В результате, можно существенно упростить систему уравнений (7.22а) и (7.22б), переписав её в виде:

$$\frac{\partial a_{01}(t)}{\partial t} = -\frac{i\gamma}{2} a_{02}(t) e^{i(\omega_0 - \omega)t}, \quad (7.23а)$$

$$\frac{\partial a_{02}(t)}{\partial t} = -\frac{i\gamma}{2} a_{01}(t) e^{-i(\omega_0 - \omega)t}. \quad (7.23б)$$

Продифференцировав уравнение (7.23а) по времени и подставим туда производную $\partial a_{02}/\partial t$ из уравнения (7.23б), получим дифференциальное уравнение второго порядка:

$$\frac{\partial^2 a_{01}}{\partial t^2} - i(\omega_0 - \omega) \frac{\partial a_{01}}{\partial t} + \frac{\gamma^2}{4} a_{01} = 0. \quad (7.24)$$

Ищем решение уравнения (7.24) в виде:

$$a_{01}(t) = C e^{i\alpha t}. \quad (7.25)$$

Подставляя (7.25) в уравнение (7.24), получаем квадратное уравнение:

$$-\alpha^2 + (\omega_0 - \omega)\alpha + \frac{\gamma^2}{4} = 0,$$

откуда

$$\alpha_{1,2} = \frac{1}{2} \left[(\omega_0 - \omega) \pm \sqrt{(\omega_0 - \omega)^2 + \gamma^2} \right].$$

В итоге, общее решение уравнения (7.24) имеет вид:

$$a_{01}(t) = e^{i(\omega_0 - \omega)t/2} \left[C_1 e^{i\sqrt{(\omega_0 - \omega)^2 + \gamma^2} t/2} + C_2 e^{-i\sqrt{(\omega_0 - \omega)^2 + \gamma^2} t/2} \right], \quad (7.26)$$

где C_1 и C_2 – константы, которые необходимо определить из начальных условий. Подставляя (7.26) в уравнение (7.23а), получим:

$$a_{02}(t) = -\frac{e^{-i(\omega_0 - \omega)t/2}}{\gamma} \left[C_1 \left(\omega_0 - \omega + \sqrt{(\omega_0 - \omega)^2 + \gamma^2} \right) e^{i\sqrt{(\omega_0 - \omega)^2 + \gamma^2}t/2} + C_2 \left(\omega_0 - \omega - \sqrt{(\omega_0 - \omega)^2 + \gamma^2} \right) e^{-i\sqrt{(\omega_0 - \omega)^2 + \gamma^2}t/2} \right], \quad (7.27)$$

Из начальных условий $a_{01}(0) = 1$, $a_{02}(0) = 0$ и выражений (7.26) и (7.27) находим:

$$C_1 = -\frac{\omega_0 - \omega - \sqrt{(\omega_0 - \omega)^2 + \gamma^2}}{2\sqrt{(\omega_0 - \omega)^2 + \gamma^2}}$$

и

$$C_2 = \frac{\omega_0 - \omega + \sqrt{(\omega_0 - \omega)^2 + \gamma^2}}{2\sqrt{(\omega_0 - \omega)^2 + \gamma^2}}.$$

Подставляя C_1 и C_2 в выражение в (7.27), получим:

$$a_{02}(t) = -\frac{i\gamma}{\sqrt{(\omega_0 - \omega)^2 + \gamma^2}} e^{-i(\omega_0 - \omega)t/2} \sin \left(\frac{\sqrt{(\omega_0 - \omega)^2 + \gamma^2}}{2} t \right).$$

Отсюда вероятность P того, что в момент времени $t = T$ спин электрона направлен против поля \mathbf{B}_0 , равна

$$P = |a_{02}(T)|^2 = \frac{\gamma^2}{(\omega_0 - \omega)^2 + \gamma^2} \sin^2 \left(\frac{\sqrt{(\omega_0 - \omega)^2 + \gamma^2}}{2} T \right). \quad (7.28)$$

Зависимость $P(\omega)$ в момент времени $T = \pi/\gamma$ представлена на рис. 7.3 для частного случая $\omega_0 = 100\gamma$. Видно, что при условии $\omega \approx \omega_0$ вероятность переворота спина резко возрастает, т.е. наблюдается резонанс.

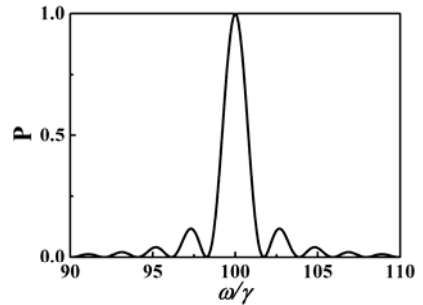


Рис. 7.3. Зависимость вероятности переворота спина в момент времени $T = \pi/\gamma$ от отношения частот ω/γ при $\omega_0 = 100\gamma$.

Рассмотрим два частных случая.

Случай А. Частота внешнего магнитного поля ω совпадает с частотой ω_0 . Тогда из (7.28) получим:

$$P = \sin^2\left(\frac{\gamma T}{2}\right) = \frac{1}{2}[1 - \cos(\gamma T)].$$

Видно, что при резонансе электрон периодически переходит из состояния χ^+ в состояние χ^- и обратно.

Случай Б. Частота внешнего магнитного поля ω существенно, но не очень сильно отличается от ω_0 , а именно: $\omega_0 \gg |\omega_0 - \omega| \gg \gamma$. В этом случае из (7.28) следует:

$$P = |a_{02}(T)|^2 = \left(\frac{\gamma T}{2}\right)^2 \left[\frac{\sin((\omega_0 - \omega)T/2)}{(\omega_0 - \omega)T/2} \right]^2.$$

Вероятность P , как функция $(\omega_0 - \omega)T/2$, резко спадает до нуля при $(\omega_0 - \omega) = 2\pi/T$ и не достигает заметной величины при больших отклонениях частоты ω от резонансной.

Замечание. Рассмотренная задача имеет важное значение для объяснения *электронного парамагнитного резонанса* (ЭПР), суть которого состоит в резонансном поглощении электромагнитного излучения (обычно в СВЧ диапазоне) неспаренными электронами вещества.

Ответ:
$$P = \frac{\gamma^2}{(\omega_0 - \omega)^2 + \gamma^2} \sin^2\left(\frac{\sqrt{(\omega_0 - \omega)^2 + \gamma^2}}{2} T\right).$$

Задача 7.2.8. Неполяризованный пучок атомов со спином $1/2$ фильтруется двумя «усовершенствованными» приборами Штерна–Герлаха, установленными один за другим. На рис. 7.4 приведено несколько вариантов относительного расположения приборов. В прибор I попадает $N \gg 1$ неполяризованных атомов. Сколько атомов вылетит из прибора II?

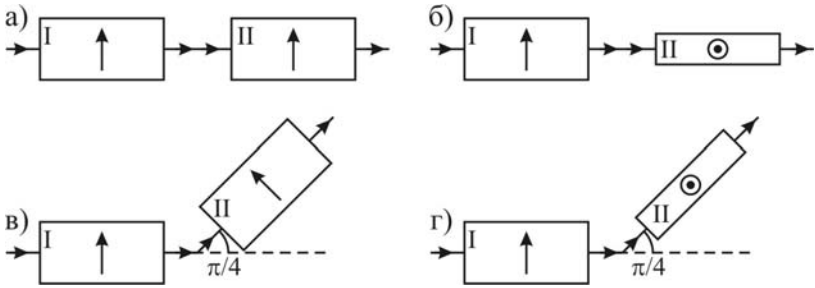


Рис. 7.4. Относительное расположение двух приборов Штерна–Герлаха.

Решение

Сделаем несколько предварительных замечаний. *Во-первых*, мы будем считать, что все атомы, вылетевшие из первого прибора Штерна–Герлаха, попадают во второй. *Во-вторых*, будем предполагать, что при изменении направления движения пучка атомов их спиновые состояния не изменяются.

Направим ось z вдоль вектора магнитной индукции \mathbf{V}_I первого прибора Штерна–Герлаха, а ось y вдоль первоначального направления движения атомов. Тогда в сферической системе координат направление вектора магнитной индукции \mathbf{V}_{II} второго прибора Штерна–Герлаха будет задаваться углами θ и φ .

Поскольку по условию задачи начальный пучок атомов не поляризован, то число атомов с проекцией спина $+\hbar/2$ и $-\hbar/2$ в нем одинаково. «Усовершенствованный» прибор Штерна–Герлаха работает как идеальный фильтр, пропуская только атомы с проекцией $+\hbar/2$ на направление магнитного поля. Таким образом, через первый прибор Штерна–Герлаха пройдет $N/2$ атомов, причем спины всех этих атомов будут направлены параллельно оси z . Вероятность пролёта атома через второй прибор Штерна–Герлаха равна вероятности того, что спин атома сонаправлен с полем \mathbf{V}_{II} , т.е.

$$P = |\langle \theta, \varphi | +z \rangle|^2 = |\langle +z | \theta, \varphi \rangle|^2 = \cos^2 \frac{\theta}{2} = \frac{1}{2} [1 + \cos \theta].$$

Здесь использовано выражение (7.11а) для амплитуды вероятности $\langle +z | \theta, \varphi \rangle$, полученное в задаче 7.2.5. Обратим внимание на то, что

эта вероятность не зависит от угла φ . Таким образом, число атомов, вылетевших из второго прибора Штерна–Герлаха, равно

$$N_2 = \frac{N}{4} [1 + \cos\theta]. \quad (7.29)$$

Используя формулу (7.29), можно решить задачу для перечисленных выше случаев:

$$а) \theta = 0 \Rightarrow N_2 = \frac{N}{2},$$

$$б) \theta = \frac{\pi}{2} \Rightarrow N_2 = \frac{N}{4},$$

$$в) \theta = \frac{\pi}{4} \Rightarrow N_2 = \frac{N}{8} (2 + \sqrt{2}) \approx 0.43N,$$

$$г) \theta = \frac{\pi}{2} \Rightarrow N_2 = \frac{N}{4}.$$

Ответ: а) $\frac{N}{2}$, б) $\frac{N}{4}$, в) $\frac{N}{8} (2 + \sqrt{2})$, г) $\frac{N}{4}$.

7.3. Короткие задачи

Задача 7.3.1. Найти, как действуют операторы $\hat{s}_{\pm} = (\hat{s}_x \pm i\hat{s}_y)/\hbar$ на собственные векторы χ^{\pm} оператора \hat{s}_z .

Решение

Найдем сначала явный вид операторов \hat{s}_{\pm} :

$$\hat{s}_+ = \frac{1}{\hbar} (\hat{s}_x + i\hat{s}_y) = \frac{1}{2} (\sigma_x + i\sigma_y) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\hat{s}_- = \frac{1}{\hbar} (\hat{s}_x - i\hat{s}_y) = \frac{1}{2} (\sigma_x - i\sigma_y) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Теперь легко показать, что

$$\hat{s}_+ \chi^+ = 0 \quad \text{и} \quad \hat{s}_+ \chi^- = \chi^+,$$

т.е. оператор \hat{s}_+ увеличивает проекцию спина электрона на ось z на \hbar , если это возможно. Аналогично, оператор \hat{s}_- уменьшает проекцию спина:

$$\hat{s}_- \chi^+ = \chi^- \quad \text{и} \quad \hat{s}_- \chi^- = 0.$$

Кроме того,

$$\hat{s}_+ \hat{s}_- + \hat{s}_- \hat{s}_+ = I.$$

Ответ: $\hat{s}_+ \chi^+ = 0$, $\hat{s}_+ \chi^- = \chi^+$, $\hat{s}_- \chi^+ = \chi^-$, $\hat{s}_- \chi^- = 0$.

Задача 7.3.2. Известно, что спин электрона сонаправлен с осью y . Найти амплитуду вероятности того, что проекция спина на ось x равна $-\hbar/2$.

Решение

Для решения задачи нужно вычислить амплитуду вероятности $\langle -x | +y \rangle$. При этом можно использовать амплитуды вероятности

$$\langle +z | \theta, \varphi \rangle = \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi/2} \quad \text{и} \quad \langle -z | \theta, \varphi \rangle = \sin \frac{\theta}{2} e^{i\varphi/2},$$

найденные в задаче 7.2.5. Действительно,

$$\begin{aligned} \langle -x | +y \rangle &= \langle -x | +z \rangle \langle +z | +y \rangle + \langle -x | -z \rangle \langle -z | +y \rangle = \\ &= \langle +z | -x \rangle^* \langle +z | +y \rangle + \langle -z | -x \rangle^* \langle -z | +y \rangle = \\ &= \langle +z | \theta = \pi/2, \varphi = \pi \rangle^* \langle +z | \theta = \pi/2, \varphi = \pi/2 \rangle + \\ &+ \langle -z | \theta = \pi/2, \varphi = \pi \rangle^* \langle -z | \theta = \pi/2, \varphi = \pi/2 \rangle = \\ &= \frac{1}{2} \left(e^{i\pi/2} e^{-i\pi/4} + e^{-i\pi/2} e^{i\pi/4} \right) = \cos \frac{\pi}{4} = \frac{1}{\sqrt{2}}. \end{aligned}$$

Ответ: $\langle -x | +y \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}$.

Задача 7.3.3. Три «усовершенствованных» прибора Штерна–Герлаха расположены так, как показано на рис. 7.5. Магнитное поле первого направлено вдоль оси z , второго – под углом θ к оси z , а третьего – в отрицательном направлении оси z . В первый прибор попадает $N \gg 1$ неполяризованных атомов. Сколько атомов вылетит из третьего прибора? При каком угле θ это число максимально?

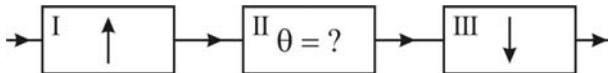


Рис. 7.5. Относительное расположение трех приборов Штерна–Герлаха.

Решение

Если первоначальный пучок атомов не поляризован, то через первый «усовершенствованный» прибор Штерна–Герлаха пройдет ровно половина атомов: $N_1 = N/2$. Число атомов, прошедших через второй прибор, вычисляется по формуле (7.29):

$$N_2 = N_1 |\langle +z | \theta \rangle|^2 = \frac{N}{2} \cos^2 \frac{\theta}{2},$$

а число атомов, прошедших через третий прибор, равно

$$N_3 = N_2 |\langle -z | \theta \rangle|^2 = \frac{N}{2} \cos^2 \frac{\theta}{2} \sin^2 \frac{\theta}{2} = \frac{N}{8} \sin^2 \theta.$$

Таким образом, максимальное число атомов $N_3^{\max} = N/8$, прошедших через систему из трех приборов Штерна–Герлаха, достигается при угле $\theta_{\max} = \pm \pi/2$.

Ответ: $N_3 = \frac{N}{8} \sin^2 \theta$, $N_3^{\max} = \frac{N}{8}$, $\theta_{\max} = \pm \frac{\pi}{2}$.

Задача 7.3.4. Рассмотрим линейно поляризованную электромагнитную волну, распространяющуюся в вакууме в направлении оси z . Если электромагнитную волну рассматривать как пучок фотонов, то у каждого из них два независимых состояния поляризации: χ_x и χ_y , соответствующие волнам, поляризованным вдоль осей x и y соответственно. Используя свои знания классической теории поляризации электромагнитных волн, найдите закон преобразования состояний χ_x и χ_y при повороте системы координат вокруг оси z на угол θ .

Решение

В задаче 3.2.7 упоминалось, что в квантовой теории роль волновой функции фотона играет векторный потенциал $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$. Его можно представить в виде

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = A(r, t) (\chi_x \mathbf{e}_x + \chi_y \mathbf{e}_y).$$

Поскольку в вакууме напряженность электрического поля $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ связана с векторным потенциалом $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ соотношением

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\partial \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)}{\partial t},$$

то понятно, что при повороте системы координат вокруг оси z состояния χ_x и χ_y фотона должны преобразоваться так же как проекции E_x и E_y вектора напряженности электрического поля.

Закон преобразования проекций E_x и E_y при повороте системы координат непосредственно следует из рис. 7.6:

$$E_{x'} = E_x \cos \theta - E_y \sin \theta,$$

$$E_{y'} = E_x \sin \theta + E_y \cos \theta.$$

Соответственно, закон преобразования для состояний χ_x и χ_y будет иметь вид:

$$\chi_{x'} = \chi_x \cos \theta - \chi_y \sin \theta,$$

$$\chi_{y'} = \chi_x \sin \theta + \chi_y \cos \theta,$$

или в обозначениях Дирака:

$$\langle x'|x \rangle = \langle y'|y \rangle = \cos \theta \quad \text{и} \quad \langle y'|x \rangle = -\langle x'|y \rangle = \sin \theta.$$

Ответ: $\chi_{x'} = \chi_x \cos \theta - \chi_y \sin \theta$, $\chi_{y'} = \chi_x \sin \theta + \chi_y \cos \theta$.

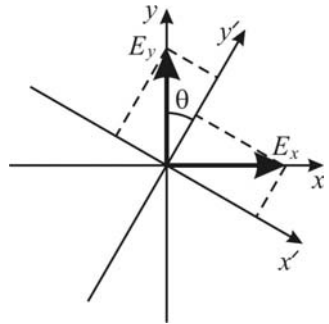


Рис. 7.6. Преобразование проекций вектора напряженности электрического поля при повороте системы координат.

7.4. Задачи для самостоятельного решения

Задача 7.4.1. Доказать следующие свойства матриц Паули:

- а) $\sigma_i^+ = \sigma_i$, б) $\sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i = 2\delta_{ij} I$, в) $\sigma_i \sigma_j = i\epsilon_{ijk} \sigma_k + \delta_{ij} I$,
 г) $(\sigma \cdot \sigma) = 3I$, д) $[\sigma \times \sigma] = 2i\sigma$, е) $\text{tr} \sigma_i = 0$, ж) $\text{tr} \sigma_i \sigma_j = 2\delta_{ij}$.

Задача 7.4.2 (4.1 [2]). Неполаризованный пучок атомов со спином $1/2$ фильтруется двумя «усовершенствованными» приборами Штерна–Герлаха, установленными один за другим. На рис. 7.7 приведено несколько вариантов относительного расположения приборов. В прибор I попадает $N \gg 1$ непolarизованных атомов. Сколько атомов вылетит из прибора II?

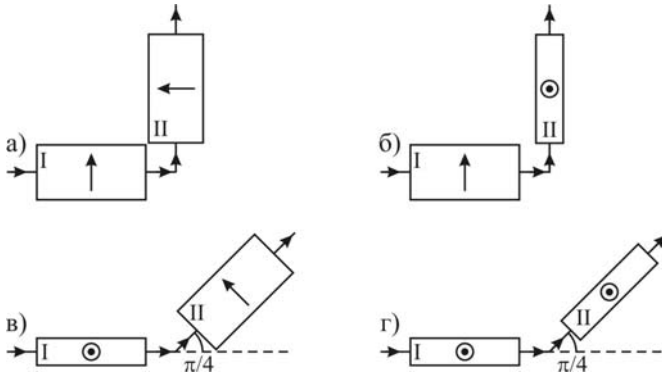


Рис. 7.7. Относительное расположение двух приборов Штерна–Герлаха.

Ответ: а) $\frac{N}{4}$, б) $\frac{N}{4}$, в) $\frac{N}{4}$, г) $\frac{N}{2}$.

Задача 7.4.3 (4.2 [2]). В некий прибор попадают частицы со спином $1/2$, причем амплитуды вероятности для направлений спина вверх и вниз относительно оси z равны соответственно a и b . Покажите, что вероятность обнаружить частицу в любой точке внутри прибора равна $|aX + bY|^2$, где X и Y – некоторые комплексные постоянные, характеризующие прибор. Как будет выражаться эта вероятность через X и Y , если спин влетевшей частицы направлен: а) вверх? б) вниз? в) по направлению оси x ? г) против направления оси x ? д) вдоль направления которое задано углами θ и φ ?

Ответ: а) $|X|^2$, б) $|Y|^2$, в) $\frac{1}{2}|X + Y|^2$, г) $\frac{1}{2}|X - Y|^2$,
 д) $\left| \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi/2} X + \sin \frac{\theta}{2} e^{i\varphi/2} Y \right|^2$.

Задача 7.4.4 (6.1 [2]). Пучок атомов со спином $1/2$ проходит через «усовершенствованный» прибор Штерна–Герлаха, пропускающий атомы со спином направленным вдоль оси z . Затем атомы проводят время T в однородном магнитном поле \mathbf{V}_0 , параллельном оси x . Покинув это поле, они попадают во второй прибор Штерна–

Герлаха, который пропускает только атомы со спином, направленным против оси z . Каково минимальное значение B_0^{\min} , при котором все атомы пройдут через второй прибор Штерна–Герлаха? Если атомы находятся в магнитном поле только половину времени, то чему равна вероятность P их прохождения через второй прибор Штерна–Герлаха?

Ответ: $B_0^{\min} = \frac{\pi\hbar}{2\mu_B T}$, $P = \frac{1}{2}$.

Задача 7.4.5. Электрон находится в однородном стационарном магнитном поле \mathbf{B} , направление которого не совпадает с направлением оси z :

$$\mathbf{B} = \{B \cos \varphi \sin \theta, B \sin \varphi \sin \theta, B \cos \theta\},$$

углы φ и θ определены так же, как в задаче 7.2.5. В начальный момент времени $t = 0$ спин электрона сонаправлен с осью z . Найти вероятности $P_{+z}(t)$ и $P_{-z}(t)$ обнаружить электрон со спином направленным в положительном и отрицательном направлениях оси z в момент времени t ?

Ответ: $P_{+z}(t) = \cos^2\left(\frac{\mu_B B}{\hbar}t\right) + \sin^2\left(\frac{\mu_B B}{\hbar}t\right)\cos^2\theta$,

$$P_{-z}(t) = \sin^2\left(\frac{\mu_B B}{\hbar}t\right)\sin^2\theta.$$

Задача 7.4.6 (6.2 [2]). Пучок атомов со спином $1/2$ проходит через «усовершенствованный» прибор Штерна–Герлаха, пропускающий атомы со спином, сонаправленным с осью z . Затем атомы попадают в магнитное поле $\mathbf{B} = \{B/\sqrt{2}, 0, B/\sqrt{2}\}$. Найти вероятности $P_{+x}(t)$ и $P_{+y}(t)$ того, что по истечении времени t спины этих атомов будут сонаправлены с осями x или y .

Ответ: $P_{+x}(t) = \frac{1}{2}\left[1 + \sin^2\left(\frac{\mu_B B}{\hbar}t\right)\right]$,

$$P_{+y}(t) = \frac{1}{2}\left[1 + \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\left(\frac{2\mu_B B}{\hbar}t\right)\right].$$

Задача 7.4.7 (7.2 [2]). Протоны с магнитным моментом μ , находящиеся в воде, помещены в однородное магнитное поле. Амплитуда поля постоянна, а направление изменяется со временем (проводится эксперимент по ядерному магнитному резонансу – ЯМР):

$$\mathbf{B} = \{B \cos \omega t \sin \theta, -B \sin \omega t \sin \theta, B \cos \theta\}.$$

В начальный момент $t_0 = 0$ спины всех протонов направлены по оси z . Найти вероятности $P_{+z}(t)$ и $P_{-z}(t)$ для направления спинов «вверх» и «вниз» в произвольный момент времени $t > 0$. Каково должно быть значение ω , чтобы наблюдался резонанс?

Замечание. Магнитный момент протона направлен в ту же сторону, что и спин протона. Спин протона равен $1/2$.

Ответ:
$$P_{+z}(t) = \cos^2 \gamma t + \left(\frac{\omega_0 \cos \theta - \omega}{2\gamma} \right) \sin^2 \gamma t,$$

$$P_{-z}(t) = \left(\frac{\omega_0 \sin \theta}{2\gamma} \right)^2 \sin^2 \gamma t, \text{ где } \omega_0 = \frac{2\mu B}{\hbar},$$

$$\gamma = \frac{1}{2} \sqrt{\omega^2 + \omega_0^2 - 2\omega\omega_0 \cos \theta}; \quad \omega_{\text{рез}} = \frac{2\mu B}{\hbar} \cos \theta.$$

Задача 7.4.8. Рассмотрим электромагнитную волну, распространяющуюся в вакууме в направлении оси z . Как и в задаче 7.3.4, будем рассматривать эту волну как пучок фотонов. Определим состояния фотонов с правой и левой круговой поляризацией следующим образом:

$$\chi_{\text{прав}} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_x + i\chi_y) \quad \text{и} \quad \chi_{\text{лев}} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_x - i\chi_y).$$

Найдите закон преобразования состояний $\chi_{\text{прав}}$ и $\chi_{\text{лев}}$ при повороте системы координат вокруг оси z на угол θ .

Ответ: $\chi'_{\text{прав}} = \chi_{\text{прав}} e^{i\theta}, \quad \chi'_{\text{лев}} = \chi_{\text{лев}} e^{-i\theta}.$

Замечание. Обратите внимание на то, что при повороте системы координат правополяризованный фотон остается правополяризованным, а левополяризованный – левополяризованным.

Задача 7.4.9 (4.5 [2]). Используя свои знания классической оптики, найдите все четыре матричных элемента $\langle i|A|j\rangle$ (индексы i и j могут принимать значения x и y) для следующих приборов A , через которые пропускается свет (в направлении оси z):

- а) поляририд, ось которого параллельна оси x ;
- б) поляририд, ось которого образует с осью x угол θ ;
- в) анализатор и синтезатор из кальцита, между которыми имеется слой стекла, сдвигающий фазу луча x на угол ϕ ;
- г) анализатор и синтезатор, повернутые на угол $\pi/4$, а также слой стекла, увеличивающий фазу луча x на угол $\pi/2$;
- д) четвертьволновая пластинка из анизотропного материала;
- е) раствор сахара, который поворачивает плоскость поляризации вправо на угол θ .

Ответ: а) $\langle x|A|x\rangle = 1$, $\langle x|A|y\rangle = \langle y|A|x\rangle = \langle y|A|y\rangle = 0$;

$$\text{б) } \langle x|A|x\rangle = \cos^2 \theta, \quad \langle x|A|y\rangle = \langle y|A|x\rangle = \sin \theta \cos \theta, \\ \langle y|A|y\rangle = \sin^2 \theta;$$

$$\text{в) } \langle x|A|x\rangle = e^{i\phi}, \quad \langle x|A|y\rangle = \langle y|A|x\rangle = 0, \quad \langle y|A|y\rangle = 1;$$

$$\text{г) } \langle x|A|x\rangle = \langle y|A|y\rangle = \frac{1+i}{2}, \quad \langle x|A|y\rangle = \langle y|A|x\rangle = \frac{1-i}{2};$$

$$\text{д) } \langle x|A|x\rangle = i, \quad \langle x|A|y\rangle = \langle y|A|x\rangle = 0, \quad \langle y|A|y\rangle = 1 \text{ (с точностью до общего фазового множителя);}$$

$$\text{е) } \langle x|A|x\rangle = \langle y|A|y\rangle = \cos \theta, \quad \langle y|A|x\rangle = -\langle x|A|y\rangle = \sin \theta.$$

Список литературы

1. Фейнман Р., Лейтон Р., Сэндс М. Фейнмановские лекции по физике. Вып. 8,9: Квантовая механика. – М.: УРСС: Книжный дом «ЛИБРОКОМ», 2013. – 528 с.

2. Фейнман Р., Лейтон Р., Сэндс М. Фейнмановские лекции по физике: Задача и упражнения с ответами и решениями к вып. 5-9. – М.: УРСС: Книжный дом «ЛИБРОКОМ», 2012. – 272 с.

ГЛАВА 8 АНСАМБЛИ НЕВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ КВАНТОВЫХ ЧАСТИЦ

8.1. Теоретический материал

Рассмотрим идеальный газ элементарных частиц в большом резервуаре объемом V . Объем одного квантового состояния частицы в импульсном пространстве равен (см. задачу 8.2.1)

$$\Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z = \frac{(2\pi\hbar)^3}{V}.$$

Среднее число частиц в i -м квантовом состоянии определяется распределением Ферми–Дирака, если речь идет о фермионах (частицах с полуцелым спином $s = 1/2, 3/2, 5/2, \dots$),

$$\bar{n}_i = \frac{1}{\exp\left(\frac{\varepsilon_i - \mu}{kT}\right) + 1},$$

или распределением Бозе–Эйнштейна, если речь идет о бозонах (частицах с целым спином $s = 0, 1, 2, \dots$),

$$\bar{n}_i = \frac{1}{\exp\left(\frac{\varepsilon_i - \mu}{kT}\right) - 1},$$

где ε_i – энергия i -го

квантового состояния, а $\mu = \left(\frac{\partial E}{\partial N}\right)_{S,V}$ – химический потенциал газа.

Распределение Ферми–Дирака изображено на рис. 8.1 для различных температур.

Химический потенциал μ ферми-газа может быть как положительным, так и отрицательным, причем при $T = 0$ химический потенциал $\mu = \varepsilon_F > 0$, где ε_F – энергия Ферми. С ростом температуры химический потенциал уменьшается (см. задачу 8.2.6). Очевидно, что $\bar{n} = 1/2$ при $\varepsilon = \mu$.

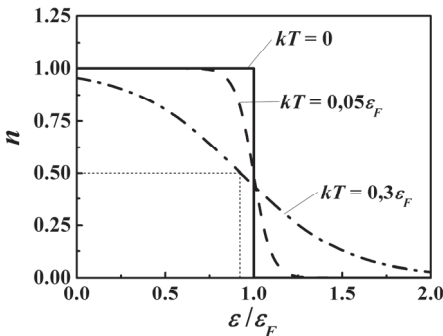


Рис. 8.1. Распределение Ферми–Дирака при различных температурах. Химический потенциал уменьшается с увеличением температуры.

Химический потенциал бозе-газа всегда отрицателен или равен нулю $\mu \leq 0$. Распределение Бозе–Эйнштейна для случаев $\mu < 0$ и $\mu = 0$ изображено на рис. 8.2. В случае газа бозонов с ненулевой массой распределение Бозе–Эйнштейна оказывается справедливым только при температуре выше температуры T_0 конденсации Бозе–Эйнштейна (см. задачу 8.2.8).

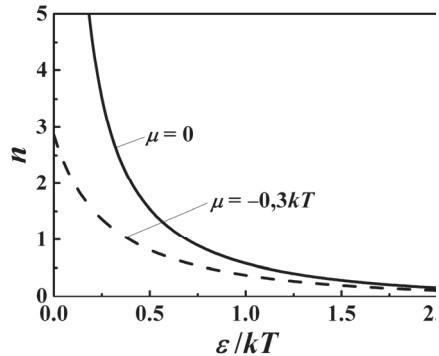


Рис. 8.2. Распределение Бозе–Эйнштейна при различных значениях химического потенциала.

Плотность вероятности $f(\epsilon)$ обнаружить частицу с энергией в интервале $(\epsilon, \epsilon + d\epsilon)$ равна (см. задачу 8.2.4)

$$f(\epsilon) = (2s + 1) \frac{1}{n} \frac{\epsilon \sqrt{\epsilon^2 - (mc^2)^2}}{2\pi^2 \hbar^3 c^3} \frac{1}{\exp\left(\frac{\epsilon - \mu}{kT}\right) \pm 1},$$

где знак «плюс» в последнем множителе соответствует случаю фермионов, а «минус» – бозонов; n – концентрация частиц.

При вычислении химического потенциала (задача 8.2.6) и теплоемкости (задачи 8.2.7) Ферми–газа удобно использовать асимптотическую формулу:

$$\int_0^{\infty} \frac{F(\epsilon) d\epsilon}{\exp\left(\frac{\epsilon - \mu}{kT}\right) + 1} = \int_0^{\mu} F(\epsilon) d\epsilon + \frac{\pi^2}{6} (kT)^2 F'(\mu) + \dots,$$

справедливую при $kT \ll \epsilon_F$. Вывод этой формулы можно найти, например, в [1] (§58).

8.2. Задачи с решениями

Задача 8.2.1. Частица находится в одномерной потенциальной яме шириной L . Потенциальная энергия частицы внутри ямы равна нулю. Считая, что ширина ямы L стремится к бес-

конечности, найти объем Δp_x одного квантового состояния в импульсном пространстве.

Решение

Выберем начало координат так, чтобы левая граница ямы совпадала с точкой $x=0$. Поскольку по условию задачи ширина ямы стремится к бесконечности, объем Δp_x одного квантового состояния не должен зависеть от выбора граничных условий, накладываемых на волновую функцию частицы в точках $x=0$ и $x=L$. Чтобы убедиться в этом, рассмотрим два варианта решения задачи.

Вариант 1. Будем считать, что за пределами ямы потенциальная энергия частицы бесконечно велика, т.е. частица не может проникнуть за пределы потенциальной ямы. Тогда энергия частицы может принимать значения (см. задачу 6.2.1)

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2, \quad \text{где } n=1,2,3,\dots$$

Отсюда следует, что средний модуль импульса частицы равен

$$|p_n| = \sqrt{2mE_n} = \frac{\pi \hbar}{L} n, \quad \text{где } n=1,2,3,\dots,$$

т.е. на одно квантовое состояние приходится область импульсного пространства, для которого разность модулей импульсов $\Delta|p|$ не превосходит $\pi \hbar / L$. Очевидно, что в одномерном случае интервалу $(|p|, |p| + \Delta|p|)$ соответствует область импульсного пространства $(-p - \Delta p, -p) \cup (p, p + \Delta p)$, объем Δp_x которой вдвое больше, чем $\Delta|p|$.

Таким образом, объем одного квантового состояния в импульсном пространстве равен

$$\Delta p_x = \frac{2\pi \hbar}{L}. \quad (8.1)$$

Вариант 2. Будем считать, что на волновую функцию частицы наложено периодическое граничное условие:

$$\Psi(x, t) = \Psi(x + L, t), \quad (8.2)$$

т.е. частица, вылетев из одного конца отрезка $[0, L]$, попадает на другой конец того же отрезка. Для наглядности можно представить, что отрезок $[0, L]$ свернут в колечко. Поскольку на отрезке $[0, L]$ потенциальная энергия частицы равна нулю, то волновую функцию частицы можно записать в виде волны де Бройля:

$$\Psi(x, t) = \text{const} \cdot \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(Et - p_x x)\right), \quad (8.3)$$

где $E = p_x^2/2m$ в нерелятивистском случае и $E = \sqrt{(mc^2)^2 + (p_x c)^2}$ – в релятивистском. Подставляя (8.3) в (8.2), получим

$$\exp\left(\frac{i}{\hbar} p_x L\right) = 1,$$

откуда

$$(p_x)_n = \frac{2\pi\hbar}{L} n, \quad \text{где } n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Видно, что допустимые значения проекции импульса находятся на одинаковом расстоянии $2\pi\hbar/L$ друг от друга. Поэтому объем одного квантового состояния в одномерном импульсном пространстве равен (сравни с (8.1))

$$\Delta p_x = \frac{2\pi\hbar}{L}.$$

Замечания.

1. Нетрудно показать, что решение этой задачи остается в силе, если на волновую функцию частицы наложить граничные условия более общего вида.

2. Формулу (8.1) можно обобщить на двумерный и трехмерный случаи. Так, объем квантового состояния в двумерном случае равен

$$\Delta p_x \Delta p_y = \frac{(2\pi\hbar)^2}{S},$$

а в трехмерном –

$$\Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z = \frac{(2\pi\hbar)^3}{V}, \quad (8.4)$$

где S и V – площадь бесконечно большого прямоугольника и объем бесконечно большого прямоугольного параллелепипеда соответственно.

3. Бесконечно большие величины L , S и V не являются физическими параметрами и, как следствие, не должны входить в выражения для наблюдаемых величин (к которым объем квантового состояния, конечно же, не относится).

Ответ: $\Delta p_x = \frac{2\pi\hbar}{L}$.

Задача 8.2.2. Частица со спином s находится в бесконечно большом прямоугольном параллелепипеде объемом V . Найти плотность квантовых состояний частицы (число квантовых состояний dn_s , приходящихся на интервал энергии частицы $d\varepsilon$).

Решение

Решим эту задачу в наиболее общем виде, т.е. будем рассматривать релятивистскую частицу массой m . Интервалу энергий частицы $(\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon)$ в импульсном пространстве соответствует шаровой слой толщиной dp (см. рис. 8.3). Для вычисления dp воспользуемся связью энергии частицы с её импульсом соотношением

$$\varepsilon^2 = (mc^2)^2 + (pc)^2. \quad (8.5)$$

Дифференцируя (8.5), найдем:

$$\varepsilon d\varepsilon = c^2 p dp,$$

откуда

$$dp = \frac{\varepsilon d\varepsilon}{pc^2} = \frac{\varepsilon d\varepsilon}{c\sqrt{\varepsilon^2 - (mc^2)^2}}. \quad (8.6)$$

Чтобы найти число квантовых состояний в шаровом слое, поделим его объем $4\pi p^2 dp$ на объем одного квантового состояния: $\Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z = (2\pi\hbar)^3 / V$. При этом необходимо учесть вырождение по проекциям спина: каждому значению энергии соответствует $(2s + 1)$ квантовых состояний с различными проекциями спина на

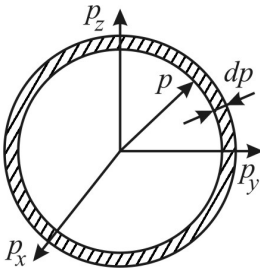


Рис. 8.3. Шаровой слой в импульсном пространстве, соответствующий интервалу энергий $(\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon)$ частицы.

ось z . Используя (8.5) и (8.6), получим число квантовых состояний в интервале энергий $(\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon)$:

$$dn_s = (2s+1)V \frac{4\pi p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3} = (2s+1)V \frac{\sqrt{\varepsilon^2 - (mc^2)^2}}{2\pi^2 \hbar^3 c^3} \varepsilon d\varepsilon.$$

Отсюда плотность квантовых состояний частицы равна

$$\rho(\varepsilon) \equiv \frac{dn_s}{d\varepsilon} = (2s+1)V \frac{\varepsilon \sqrt{\varepsilon^2 - (mc^2)^2}}{2\pi^2 \hbar^3 c^3}. \quad (8.7)$$

Замечания. В дальнейшем нам потребуются два предельных случая выражения (8.7) для плотности квантовых состояний.

1. В случае *нерелятивистских* частиц:

$$\varepsilon = mc^2 + E,$$

где E – кинетическая энергия частицы, причем $E \ll mc^2$. Тогда

$$\varepsilon \approx mc^2, \quad \sqrt{\varepsilon^2 - (mc^2)^2} \approx c\sqrt{2mE}. \quad (8.8)$$

Подставляя (8.8) в формулу (8.7), получим:

$$\rho(E) = (2s+1)V \frac{\sqrt{2m^{3/2}}}{2\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E}.$$

В частности, плотность квантовых состояний нерелятивистского электрона ($s = 1/2$) равна

$$\rho(E) = V \frac{\sqrt{2m^{3/2}}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E}. \quad (8.9)$$

2. В *ультрарелятивистском* приближении, $E \gg mc^2$, из (8.7) получаем:

$$\rho(E) = (2s+1)V \frac{E^2}{2\pi^2 \hbar^3 c^3}.$$

Если записать энергию частицы в виде $E = \hbar\omega$ и интересоваться плотностью квантовых состояний не по энергии E , а по частоте ω , то

$$\rho(\omega) \equiv \frac{dn_s}{d\omega} = \hbar \frac{dn_s}{dE} = (2s+1)V \frac{\omega^2}{2\pi^2 c^3}.$$

3. Обратим особое внимание на случай фотона в вакууме. Спин фотона равен единице, и число $(2s+1)$ равно трем. Однако

нужно помнить, что на электромагнитные волны в вакууме накладывается одно дополнительное условие – условие калибровки. В результате, каждому значению энергии соответствуют только два квантовых состояния фотона: с левой и правой круговой поляризацией (продольных фотонов в вакууме не бывает). Таким образом, плотность квантовых состояний фотона в вакууме равна

$$\rho(\omega) = V \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3}. \quad (8.10)$$

Ответ:
$$\rho(\varepsilon) = (2s + 1)V \frac{\varepsilon \sqrt{\varepsilon^2 - (mc^2)^2}}{2\pi^2 \hbar^3 c^3}.$$

Задача 8.2.3. Получить распределение Ферми–Дирака, исходя из закона возрастания энтропии.

Решение

Рассмотрим свободный газ невзаимодействующих фермионов как замкнутую систему, объем которой постоянен. Распределим все квантовые состояния отдельной частицы газа по группам, каждая из которых содержит близкие по энергиям состояния. Перенумеруем эти группы состояний номерами $i = 1, 2, 3, \dots$. Пусть G_i – число квантовых состояний в i -ой группе, а N_i – число фермионов в этих состояниях. При этом полагаем, что $G_i \gg 1$ и $N_i \gg 1$. Макроскопическое состояние газа полностью характеризуется набором чисел N_i . В частности, полное число частиц N и энергия E газа определяются выражениями:

$$N = \sum_i N_i = \sum_i G_i \bar{n}_i \quad \text{и} \quad E = \sum_i \varepsilon_i N_i = \sum_i \varepsilon_i G_i \bar{n}_i, \quad (8.11)$$

где \bar{n}_i – среднее число частиц в одном квантовом состоянии, ε_i – энергия частицы в этом состоянии.

Для вычисления энтропии газа необходимо вычислить его статистический вес Γ , т.е. полное число микросостояний, посредством которых реализуется данное макроскопическое состояние. Рассматривая каждую группу из N_i частиц как независимую систему и обозначая её статистический вес как Γ_i , получим, что $\Gamma = \prod_i \Gamma_i$. Тогда энтропия рассматриваемого газа равна

$$S = k \ln \Gamma = k \sum_i \ln \Gamma_i. \quad (8.12)$$

Таким образом, задача о вычислении энтропии сводится к нахождению статистического веса i -й подсистемы.

Статистический вес Γ_i равен числу способов, которыми можно разместить N_i одинаковых частиц по G_i состояниям, причем в силу принципа запрета Паули в одном квантовом состоянии может находиться не более одного фермиона (очевидно, что N_i должно быть меньше, чем G_i). Согласно формулам элементарной комбинаторики:

$$\Gamma_i = \frac{G_i!}{N_i!(G_i - N_i)!},$$

откуда

$$\ln \Gamma_i = \ln G_i! - \ln N_i! - \ln(G_i - N_i)!. \quad (8.13)$$

Для дальнейшего решения задачи воспользуемся приближенной формулой $\ln N! \approx N \ln N - N$, справедливой при $N \gg 1$. Тогда, подставляя $N_i = G_i \bar{n}_i$ в (8.13) и (8.12), получим окончательное выражение для энтропии Ферми-газа:

$$\begin{aligned} S &= k \sum_i \ln \Gamma_i = k \sum_i [G_i \ln G_i - N_i \ln N_i - (G_i - N_i) \ln(G_i - N_i)] = \\ &= -k \sum_i G_i [\bar{n}_i \ln \bar{n}_i + (1 - \bar{n}_i) \ln(1 - \bar{n}_i)]. \end{aligned} \quad (8.14)$$

Энтропия газа максимальна при условии постоянства полного числа частиц N и энергии газа E . Поэтому \bar{n}_i можно найти из условия:

$$dS + \alpha dN + \beta dE = 0, \quad (8.15)$$

которое эквивалентно условию:

$$\frac{\partial}{\partial \bar{n}_i} (S + \alpha N + \beta E) = 0, \quad (8.16)$$

где α и β – неопределенные множители Лагранжа. Дифференцируя выражения (8.11) и (8.14) по \bar{n}_i , из (8.16) получим:

$$\alpha + \beta \epsilon_i - k \ln \left(\frac{\bar{n}_i}{1 - \bar{n}_i} \right) = 0,$$

откуда

$$\bar{n}_i = \frac{1}{\exp\left(\frac{-\alpha - \beta \varepsilon_i}{k}\right) + 1}. \quad (8.17)$$

Чтобы выяснить физический смысл коэффициентов α и β , запишем первое начало термодинамики для системы, объем которой постоянен ($dV = 0$)

$$dE = TdS + \mu dN. \quad (8.18)$$

С другой стороны, из условия (8.15) следует, что

$$dE = -\frac{1}{\beta} dS - \frac{\alpha}{\beta} dN. \quad (8.19)$$

Сравнивая формулы (8.18) и (8.19), видим, что

$$\alpha = \frac{\mu}{T} \quad \text{и} \quad \beta = -\frac{1}{T}. \quad (8.20)$$

Подставляя (8.20) в (8.17), получим распределение Ферми–Дирака:

$$\bar{n}_i = \frac{1}{\exp\left(\frac{\varepsilon_i - \mu}{kT}\right) + 1}. \quad (8.21)$$

Задача 8.2.4. Получить распределение Бозе–Эйнштейна, исходя из закона возрастания энтропии.

Решение

Решение данной задачи полностью аналогично решению задачи 8.2.3. Отличие состоит лишь в вычислении статистического веса Γ_i . Нам необходимо вычислить число способов, которыми можно разместить N_i одинаковых бозе-частиц по G_i состояниям, причем в каждом квантовом состоянии может находиться сколько угодно частиц.

Рассмотрим простой пример. Пусть нам надо разместить десять шаров по пяти одинаковым ящикам. Это можно сделать, например, так:

$$\bullet | \bullet \bullet \bullet | | \bullet \bullet \bullet \bullet | \bullet \bullet$$

Здесь точками обозначены одинаковые шары, а вертикальными черточками – стенки ящиков. Каждая из этих четырех стенок может находиться в одном из четырнадцати положений, поэтому стенки ящиков можно разместить $14!/4!10! = 1001$ способами.

Обобщая полученный результат, приходим к выводу, что

$$\Gamma_i = \frac{(G_i + N_i - 1)!}{N_i!(G_i - 1)!}.$$

Действуя далее аналогично задаче 8.2.3, найдем выражение для энтропии бозе-газа

$$\begin{aligned} S &= k \sum_i \ln \Gamma_i = k \sum_i \left[(G_i + N_i) \ln(G_i + N_i) - N_i \ln N_i - G_i \ln G_i \right] = \\ &= k \sum_i G_i \left[(1 + \bar{n}_i) \ln(1 + \bar{n}_i) - \bar{n}_i \ln \bar{n}_i \right]. \end{aligned} \quad (8.22)$$

Из условия

$$\frac{\partial}{\partial \bar{n}_i} (S + \alpha N + \beta E) = 0$$

и формул (8.11) и (8.22) получим

$$\alpha + \beta \varepsilon_i + k \ln \left(\frac{\bar{n}_i + 1}{\bar{n}_i} \right) = 0,$$

откуда следует распределение Бозе–Эйнштейна:

$$\bar{n}_i = \frac{1}{\exp\left(\frac{-\alpha - \beta \varepsilon_i}{k}\right) - 1} = \frac{1}{\exp\left(\frac{\varepsilon_i - \mu}{kT}\right) - 1}. \quad (8.23)$$

Замечания. Сделаем ряд замечаний, общих для задач 8.2.3 и 8.2.4.

1. Подчеркнем, что величины \bar{n}_i – это средние числа заполнения квантовых состояний с энергиями ε_i , а не плотности вероятности распределения по энергии. Если речь идет о массивных фермионах или бозонах, то \bar{n}_i нормированы условием

$$\sum_i G_i \bar{n}_i = N,$$

из которого можно определить величину химического потенциала μ . Если считать, что величины ε_i расположены близко друг к другу, то можно перейти к непрерывной величине энергии ε , и условие нормировки будет иметь вид:

$$\int_0^{\infty} \rho(\epsilon) \bar{n}(\epsilon) d\epsilon = N.$$

Таким образом, плотность вероятности $f(\epsilon)$ обнаружить частицу с энергией в интервале $(\epsilon, \epsilon + d\epsilon)$ равна

$$f(\epsilon) = \frac{\bar{n}(\epsilon)\rho(\epsilon)}{N} = (2s+1) \frac{1}{n} \frac{\epsilon \sqrt{\epsilon^2 - (mc^2)^2}}{2\pi^2 \hbar^3 c^3} \frac{1}{\exp\left(\frac{\epsilon - \mu}{kT}\right) \pm 1}, \quad (8.24)$$

где знак плюс в последнем множителе соответствует случаю фермионов, а минус – случаю бозонов; $n = N/V$ – концентрация частиц; выражение для плотности состояний $\rho(\epsilon)$ было получено в задаче 8.2.2 (формула (8.7)). Обратим внимание на то, что плотность вероятности $f(\epsilon)$ не зависит от нормировочного объема V .

2. В случае бозонов химический потенциал μ должен быть отрицательным или равным нулю, иначе $f(\epsilon)$ будет неограниченно возрастать при $\epsilon = \mu$. В то же время химический потенциал Ферми-газа может быть как положительным, так и отрицательным.

3. Особого внимания заслуживает случай газа безмассовых частиц, например, фотонов. Число частиц N в таком газе является переменной величиной и должно определяться из условия теплового равновесия. При заданном объеме V и температуре T термодинамическое равновесие соответствует минимуму свободной энергии F , дифференциал которой равен

$$dF = -SdT - PdV + \mu dN.$$

Поскольку $dT = 0$ и $dV = 0$, то из условия $dF = 0$ следует, что $\mu = 0$.

Задача 8.2.5. Концентрация свободного нерелятивистского электронного (неполяризованного) газа равна n . Найти для такого газа энергию Ферми ϵ_F и соответствующий импульс p_F , а также среднюю кинетическую энергию \bar{E} газа при нулевой температуре ($T = 0$ К).

Решение

Энергия ϵ_F и импульс p_F Ферми – это, по определению, максимально возможные энергия и импульс электрона в электронном газе при абсолютном нуле температур ($T=0$ К). Ввиду важности рассматриваемой задачи решим её двумя способами.

Способ 1. Воспользуемся формулой (8.24) для плотности вероятности обнаружить частицу с энергией в интервале $(\epsilon, \epsilon + d\epsilon)$:

$$f(\epsilon) = \left[(2s+1) \frac{1}{n} \frac{\epsilon \sqrt{\epsilon^2 - (mc^2)^2}}{2\pi^2 \hbar^3 c^3} \right] \frac{1}{\exp\left(\frac{\epsilon - \mu}{kT}\right) \pm 1}.$$

Для нерелятивистского электронного газа $s=1/2$ и $\epsilon = mc^2 + E$. Выражение в квадратных скобках преобразуется так же, как при выводе формулы (8.9). В последнем сомножителе в знаменателе мы должны выбрать знак «+». При температуре $T=0$ этот сомножитель (распределение Ферми–Дирака) имеет вид прямоугольной ступеньки (см. рис. 8.1), поэтому, по определению энергии Ферми, $\mu = \epsilon_F$. В результате плотность вероятности $f(\epsilon)$ будет иметь вид

$$f(E) = \begin{cases} \frac{1}{n} \frac{\sqrt{2} m^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E}, & E \leq \epsilon_F, \\ 0, & E > \epsilon_F. \end{cases} \quad (8.25)$$

Тогда, подставляя (8.25) в условие нормировки плотности вероятности

$$1 = \int_0^{\infty} f(E) dE = \frac{1}{n} \frac{\sqrt{2} m^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \int_0^{\epsilon_F} \sqrt{E} dE = \frac{1}{3\pi^2 n} \left(\frac{2m\epsilon_F}{\hbar^2} \right)^{3/2},$$

находим выражение для энергии Ферми:

$$\epsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3} \quad (8.26)$$

и импульса Ферми:

$$p_F = \sqrt{2m\epsilon_F} = \hbar (3\pi^2 n)^{1/3}. \quad (8.27)$$

Средняя кинетическая энергия электронного газа может быть вычислена по формуле:

$$\bar{E} = \int_0^{\infty} E f(E) dE. \quad (8.28)$$

Для удобства вычисления интеграла в (8.28) поделим его на нормировочный интеграл, равный единице. Тогда

$$\bar{E} = \frac{\int_0^{\infty} E f(E) dE}{\int_0^{\infty} f(E) dE} = \frac{\int_0^{\epsilon_F} E \sqrt{E} dE}{\int_0^{\epsilon_F} \sqrt{E} dE} = \frac{\frac{2}{5} \epsilon_F^{5/2}}{\frac{2}{3} \epsilon_F^{3/2}} = \frac{3}{5} \epsilon_F. \quad (8.29)$$

Способ 2. Если нам не требуется вычислять \bar{E} , то для нахождения импульса p_F и энергии ϵ_F Ферми можно воспользоваться следующими простыми соображениями. При $T=0$ электроны заполняют состояния с минимально возможной энергией. Поскольку согласно принципу Паули в одном состоянии не может находиться больше одного фермиона, все заполненные при $T=0$ состояния в импульсном пространстве лежат внутри сферы радиуса p_F (см. рис. 8.4). Число квантовых состояний внутри этой сферы равно

$$n_s = (2s+1)V \frac{4\pi p_F^3/3}{(2\pi\hbar)^3} = V \frac{p_F^3}{3\pi^2 \hbar^3}$$

и соответственно равно числу электронов в газе $n_s = N = nV$, откуда получаем выражения для импульса Ферми

$$p_F = \hbar (3\pi^2 n)^{1/3}$$

и энергии Ферми

$$\epsilon_F = \frac{p_F^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3},$$

совпадающие с (8.27) и (8.26).

Замечания.

1. При рассмотрении электронного газа мы полностью пренебрегли взаимодействием электронов друг с другом, поэтому полная энергия одного электрона равна сумме его кинетической энергии и энергии покоя ($\epsilon = mc^2 + E$). При этом мы предполагали,

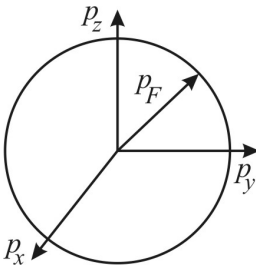


Рис. 8.4. Сфера в импульсном пространстве, полностью заполненная при абсолютном нуле температур.

что электроны находятся в некотором большом резервуаре, в котором помимо электронов равномерно распределен положительный заряд с плотностью $\rho_+ = |q_e|n$. Таким образом, система «электронный газ + положительно заряженный фон» в целом электрически нейтральна. Мы можем считать, что положительно заряженный фон полностью экранирует кулоновское взаимодействие между электронами, что позволяет нам считать электронный газ идеальным.

2. Рассматриваемая нами модель идеального электронного газа может быть взята в качестве начального приближения при рассмотрении электронов проводимости в металле или электронов в электронно-ионной плазме.

3. Необходимо обратить особое внимание на то, что энергия Ферми ε_F , а с ней и температура вырождения электронного газа $T_F = \varepsilon_F/k$ пропорциональны $n^{2/3}$. Это означает, что достаточно плотный электронный газ может оставаться вырожденным даже при очень высоких температурах, что имеет место, например, внутри «белых карликов».

$$\text{Ответ: } \varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3}, \quad p_F = \hbar (3\pi^2 n)^{1/3}, \quad \bar{E} = \frac{3}{5} \varepsilon_F.$$

Задача 8.2.6. Концентрация свободного нерелятивистского электронного (неполяризованного) газа равна n . Найти зависимость химического потенциала μ от температуры при $kT \ll \varepsilon_F$.

Решение

При отличной от нуля температуре плотность вероятности имеет вид:

$$f(E) = \frac{1}{n} \frac{\sqrt{2} m^{3/2} \sqrt{E}}{\pi^2 \hbar^3 \exp\left(\frac{E - \mu}{kT}\right) + 1}. \quad (8.30)$$

Отметим, что при переходе от распределения (8.24) по полной энергии $\varepsilon = mc^2 + E$ к распределению (8.30) по кинетической энергии E мы переопределили химический потенциал, вычтя из него энергию покоя электрона mc^2 . То же самое было сделано и в задаче 8.2.5 (способ 1).

Теперь химический потенциал находится из условия нормировки

$$1 = \int_0^{\infty} f(E) dE = \frac{1}{n} \frac{\sqrt{2} m^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{E} dE}{\exp\left(\frac{E - \mu}{kT}\right) + 1} \equiv \frac{1}{n} \frac{\sqrt{2} m^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} I. \quad (8.31)$$

Для вычисления интеграла в выражении (8.31) воспользуемся асимптотической формулой:

$$\int_0^{\infty} \frac{F(\epsilon) d\epsilon}{\exp\left(\frac{\epsilon - \mu}{kT}\right) + 1} = \int_0^{\mu} F(\epsilon) d\epsilon + \frac{\pi^2}{6} (kT)^2 F'(\mu) + \dots, \quad (8.32)$$

справедливой при низкой температуре $kT \ll \epsilon_F$. В нашем случае

$$F(E) = \sqrt{E}, \quad F'(\mu) = \frac{1}{2\sqrt{\mu}}, \quad \int_0^{\mu} \sqrt{E} dE = \frac{2}{3} \mu^{3/2}. \quad (8.33)$$

Поэтому, подставляя (8.33) в (8.32), получим:

$$I \approx \frac{2}{3} \mu^{3/2} + \frac{\pi^2 (kT)^2}{12 \sqrt{\mu}}. \quad (8.34)$$

В первом слагаемом выражения (8.34) химический потенциал представим в виде $\mu = \epsilon_F - \Delta\mu$, где $\Delta\mu \ll \epsilon_F$ — малая добавка к химическому потенциалу. Тогда $\mu^{3/2} \approx \epsilon_F^{3/2} - \frac{3}{2} \Delta\mu \sqrt{\epsilon_F}$. Во втором слагаемом можно положить $\sqrt{\mu} \approx \sqrt{\epsilon_F}$, т.к. оно уже содержит малый параметр $(kT)^2$. В итоге, из (8.34) получим:

$$I \approx \frac{2}{3} \epsilon_F^{3/2} - \Delta\mu \sqrt{\epsilon_F} + \frac{\pi^2 (kT)^2}{12 \sqrt{\epsilon_F}}. \quad (8.35)$$

С другой стороны, точное значение интеграла I , очевидно, не зависит от температуры и из условия нормировки равно $2\epsilon_F^{3/2}/3$ (см. формулу (8.29)). Таким образом, из (8.35) получаем температурную поправку к химическому потенциалу:

$$\Delta\mu \approx \frac{\pi^2 (kT)^2}{12 \epsilon_F}.$$

Окончательное выражение для химического потенциала принимает вид:

$$\mu(T) \approx \varepsilon_F \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{\varepsilon_F} \right)^2 \right]. \quad (8.36)$$

Обратим внимание на два обстоятельства. Во-первых, с ростом температуры химический потенциал убывает. Во-вторых, зависимость химического потенциала от температуры появляется только в члене второго порядка малости по параметру kT/ε_F . Поэтому при рассмотрении эффектов первого порядка малости по параметру kT/ε_F зависимостью химического потенциала от температуры можно пренебречь.

Ответ: $\mu(T) \approx \varepsilon_F \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{\varepsilon_F} \right)^2 \right]$, где $\varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3}$.

Задача 8.2.7. Концентрация свободного нерелятивистского электронного (неполяризованного) газа равна n . Найти зависимость молярной теплоемкости C_V электронного газа от температуры при $kT \ll \varepsilon_F$.

Решение

Вначале качественно оценим теплоемкость C_V электронного газа. При низких температурах $kT \ll \varepsilon_F$ распределение Ферми–Дирака имеет вид слабо «размытой» прямоугольной ступеньки, причем ширина «размытия» $\Delta\varepsilon \sim kT$ (см. задачу 8.3.3). Вклад в теплоемкость (а также теплопроводность, электропроводность и т.д.) электронного газа могут давать только электроны с энергией в интервале $(\varepsilon_F - \Delta\varepsilon/2, \varepsilon_F + \Delta\varepsilon/2)$. Действительно, вклад в теплоемкость могут давать лишь электроны, находящиеся в термодинамическом равновесии, т.е. те электроны, которые могут взаимодействовать с другими электронами и внешней средой. В результате взаимодействия изменяется импульс электрона. Однако, если энергия электрона $E \ll \varepsilon_F$, то все квантовые состояния с импульсами, близкими к начальному, заняты. Следовательно, в силу принципа Паули, такой электрон не может изменить своего импульса, т.е. не может участвовать ни в каких взаимодействиях;

он не находится в термодинамическом равновесии с электронным газом и не дает вклада в теплоемкость. Таким образом, относительное число электронов, дающих вклад в теплоемкость, может быть оценено по формуле:

$$\frac{\Delta N}{N} \approx f|_{T=0}(\epsilon_F)\Delta\epsilon \sim \frac{\Delta\epsilon}{\epsilon_F} \sim \frac{kT}{\epsilon_F},$$

где $f|_{T=0}(E)$ – плотность вероятности (8.25) обнаружить электрон с энергией $(E, E + dE)$ при нулевой температуре (см. задачу 8.2.5). Теплоемкость классического газа пропорциональна числу степеней свободы, поэтому для электронного газа мы ожидаем, что его молярная теплоемкость

$$C_V \sim R \left(\frac{kT}{\epsilon_F} \right), \quad (8.37)$$

где R – универсальная газовая постоянная.

Перейдем теперь к количественному решению поставленной задачи. Для этого вычислим среднюю энергию электронного газа при отличной от нуля температуре ($kT \ll \epsilon_F$):

$$\bar{E} = \int_0^{\infty} E f(E) dE, \quad \text{где} \quad f(E) = \frac{1}{n} \frac{\sqrt{2} m^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \frac{\sqrt{E}}{\exp\left(\frac{E - \mu}{kT}\right) + 1}.$$

Сделать это можно двумя способами.

Способ 1. Если нам известна зависимость химического потенциала от температуры (8.36), то при вычислении интеграла

$\int_0^{\infty} E f(E) dE$ удобнее всего воспользоваться асимптотическим разложением (8.32). В нашем случае:

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} E f(E) dE &= \frac{1}{n} \frac{\sqrt{2} m^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \int_0^{\infty} \frac{E^{3/2} dE}{\exp\left(\frac{E - \mu}{kT}\right) + 1} \approx \\ &\approx \frac{1}{n} \frac{\sqrt{2} m^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \left[\frac{2}{5} \mu^{5/2} + \frac{\pi^2}{4} (kT)^2 \sqrt{\epsilon_F} \right] \approx \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\approx \frac{1}{n} \frac{\sqrt{2}m^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \left[\frac{2}{5} \varepsilon_F^{5/2} \left(1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{\varepsilon_F} \right)^2 \right)^{5/2} + \frac{\pi^2}{4} (kT)^2 \sqrt{\varepsilon_F} \right] \approx \\
&\approx \frac{1}{n} \frac{\sqrt{2}m^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \left[\frac{2}{5} \varepsilon_F^{5/2} - \frac{\pi^2}{12} (kT)^2 \sqrt{\varepsilon_F} + \frac{\pi^2}{4} (kT)^2 \sqrt{\varepsilon_F} \right] = \\
&= \frac{1}{n} \frac{\sqrt{2}m^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \left[\frac{2}{5} \varepsilon_F^{5/2} + \frac{\pi^2}{6} (kT)^2 \sqrt{\varepsilon_F} \right].
\end{aligned}$$

Здесь мы воспользовались выражением (8.36) для химического потенциала, полученным в **задаче 8.2.6**. В результате для средней энергии электронного газа получим:

$$\bar{E} = \frac{\int_0^\infty E f(E) dE}{\int_0^\infty f(E) dE} \approx \frac{\frac{2}{5} \varepsilon_F^{5/2} + \frac{\pi^2}{6} (kT)^2 \sqrt{\varepsilon_F}}{\frac{2}{3} \varepsilon_F^{3/2}} = \frac{3}{5} \varepsilon_F + \frac{\pi^2}{4} \frac{(kT)^2}{\varepsilon_F}. \quad (8.38)$$

Первое слагаемое в (8.38) представляет собой энергию электронного газа при нулевой температуре (8.29) (см. **задачу 8.2.5**), а второе слагаемое связано с тепловым движением электронов. Используя (8.38), вычислим молярную теплоемкость C_V электронного газа:

$$C_V = N_A \left(\frac{\partial \bar{E}}{\partial T} \right)_{V, N} \approx \frac{\pi^2}{2} R \left(\frac{kT}{\varepsilon_F} \right). \quad (8.39)$$

Способ 2. Молярную теплоемкость C_V можно вычислить и без использования выражения (8.36). Поступим следующим образом. Внутренняя энергия одного моля электронного газа равна

$$E = N_A \bar{E} = N_A \int_0^\infty E f(E) dE = \int_0^\infty E \rho(E) \bar{n}(E) dE,$$

где $\rho(E) = V \frac{\sqrt{2}m^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E}$ – плотность квантовых состояний нерелятивистского электрона, $\bar{n}(E)$ – распределение Ферми–Дирака. Тогда молярная теплоемкость электронного газа равна

$$C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_{V,N} = \int_0^{\infty} E \rho(E) \frac{\partial \bar{n}(E)}{\partial T} dE. \quad (8.40)$$

Распределение Ферми–Дирака нормировано условием:

$$N_A = \int_0^{\infty} \rho(E) \bar{n}(E) dE. \quad (8.41)$$

Дифференцируя (8.41) по температуре и умножая на ϵ_F , получим:

$$0 = \int_0^{\infty} \epsilon_F \rho(E) \frac{\partial \bar{n}(E)}{\partial T} dE. \quad (8.42)$$

Вычитая (8.42) из (8.40), получим:

$$C_V = \int_0^{\infty} (E - \epsilon_F) \rho(E) \frac{\partial \bar{n}(E)}{\partial T} dE. \quad (8.43)$$

Вычислим производную $\frac{\partial \bar{n}(E)}{\partial T}$ (при этом сразу можно считать, что при низких температурах $\mu \approx \epsilon_F$)

$$\frac{\partial \bar{n}(E)}{\partial T} = \frac{d}{dT} \left[\frac{1}{\exp\left(\frac{E - \epsilon_F}{kT}\right) + 1} \right] = \frac{\exp\left(\frac{E - \epsilon_F}{kT}\right)}{\left[\exp\left(\frac{E - \epsilon_F}{kT}\right) + 1 \right]^2} \frac{E - \epsilon_F}{kT^2}. \quad (8.44)$$

Выражение (8.44) отлично от нуля только в области «размытия» распределения Ферми–Дирака, т.е. в узкой области вблизи энергии Ферми. Поэтому при вычислении C_V плотность состояний $\rho(E)$ можно заменить на $\rho(\epsilon_F)$ и вынести из под знака интеграла. Тогда, подставляя (8.44) в (8.43), получим:

$$C_V \approx \rho(\epsilon_F) k \int_0^{\infty} \frac{\exp\left(\frac{E - \epsilon_F}{kT}\right)}{\left[\exp\left(\frac{E - \epsilon_F}{kT}\right) + 1 \right]^2} \left(\frac{E - \epsilon_F}{kT} \right)^2 dE. \quad (8.45)$$

Делая в (8.45) замену переменных $\frac{E - \epsilon_F}{kT} = x$, приведем его к виду:

$$C_V \approx \rho(\varepsilon_F) k^2 T \int_{-\frac{\varepsilon_F}{kT}}^{\infty} \frac{x^2 e^x}{(e^x + 1)^2} dx \approx \rho(\varepsilon_F) k^2 T \int_{-\infty}^{\infty} \frac{x^2 e^x}{(e^x + 1)^2} dx. \quad (8.46)$$

Здесь мы воспользовались тем, что $kT \ll \varepsilon_F$. Входящий в (8.46) интеграл – табличный:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{x^2 e^x}{(e^x + 1)^2} dx = \frac{\pi^2}{3}, \quad (8.47)$$

а плотность состояний электронного газа на уровне Ферми равна

$$\rho(\varepsilon_F) = V \frac{\sqrt{2m^{3/2}}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{\varepsilon_F} = \frac{3}{2} \frac{N_A}{\varepsilon_F}, \quad \text{где} \quad \varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3}. \quad (8.48)$$

Подставляя (8.47) и (8.48) в (8.46), окончательно получим формулу, совпадающую с (8.39):

$$C_V(T) \approx \frac{\pi^2}{2} R \left(\frac{kT}{\varepsilon_F} \right).$$

Отметим, что выражение (8.39) с точностью до множителя $\pi^2/2 \approx 4,9$ совпадает с качественной оценкой (8.37).

Ответ: $C_V(T) \approx \frac{\pi^2}{2} R \left(\frac{kT}{\varepsilon_F} \right)$, где $\varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3}$.

Задача 8.2.8. Концентрация свободного нерелятивистского (неполяризованного) газа бозонов массой $m > 0$ со спином s равна n . Найти температуру T_0 конденсации Бозе–Эйнштейна и концентрацию n_0 конденсата.

Решение

В отличие от распределения Ферми–Дирака, распределение Бозе–Эйнштейна для бозонов с ненулевой массой справедливо только при температурах, превышающих температуру T_0 , называемую температурой конденсации Бозе–Эйнштейна. При этом химический потенциал μ бозе-газа отрицателен. При температуре $T = T_0$ химический потенциал обращается в нуль ($\mu = 0$).

Для нахождения температуры T_0 воспользуемся общей формулой (8.24) для плотности вероятности $f(\varepsilon)$:

$$f(\varepsilon) = (2s+1) \frac{1}{n} \frac{\varepsilon \sqrt{\varepsilon^2 - (mc^2)^2}}{2\pi^2 \hbar^3 c^3} \frac{1}{\exp\left(\frac{\varepsilon - \mu}{kT}\right) \pm 1},$$

в которой мы должны выбрать знак « \leftrightarrow » в знаменателе. В нерелятивистском приближении:

$$\varepsilon \approx mc^2, \quad \sqrt{\varepsilon^2 - (mc^2)^2} \approx c\sqrt{2mE}, \quad \mu = \mu_{\text{нерег}} + mc^2,$$

где E – кинетическая энергия частицы. Тогда при $T = T_0$ ($\mu_{\text{нерег}} = 0$) получим:

$$f(E) = (2s+1) \frac{1}{n} \frac{m^{3/2}}{\sqrt{2\pi^2 \hbar^3}} \frac{\sqrt{E}}{\exp\left(\frac{E}{kT_0}\right) - 1}. \quad (8.49)$$

Функция распределения (8.49) должна удовлетворять условию нормировки:

$$\begin{aligned} 1 &= \int_0^{\infty} f(E) dE = \frac{1}{n} \frac{(2s+1) m^{3/2}}{\sqrt{2\pi^2 \hbar^3}} \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{E}}{\exp\left(\frac{E}{kT_0}\right) - 1} dE = \\ &= \frac{1}{n} \frac{(2s+1) (mkT_0)^{3/2}}{\sqrt{2\pi^2 \hbar^3}} \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{x} dx}{e^x - 1}. \end{aligned} \quad (8.50)$$

Входящий в (8.50) интеграл равен

$$\int_0^{\infty} \frac{\sqrt{x} dx}{e^x - 1} = \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \approx \frac{\sqrt{\pi}}{2} 2,612 \approx 2,315,$$

где $\zeta(x)$ – дзета-функция Римана.

Выражая T_0 из (8.50), получим:

$$T_0 = \frac{3,31}{(2s+1)^{2/3}} \frac{\hbar^2}{mk} n^{2/3}. \quad (8.51)$$

При температуре $T < T_0$ только часть бозонов будет распределена по энергиям согласно распределению Бозе–Эйнштейна. Вычислим концентрацию $n_{E>0}$ таких бозонов:

$$\begin{aligned}
 n_{E>0} &= n \int_0^{\infty} f(E) \Big|_{\mu=0} dE = \frac{(2s+1)(mkT)^{3/2}}{\sqrt{2\pi^2\hbar^3}} \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{x} dx}{e^x - 1} = \\
 &= n \left[\frac{1}{n} \frac{(2s+1)(mkT_0)^{3/2}}{\sqrt{2\pi^2\hbar^3}} \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{x} dx}{e^x - 1} \right] \left(\frac{T}{T_0} \right)^{3/2} = n \left(\frac{T}{T_0} \right)^{3/2}. \quad (8.52)
 \end{aligned}$$

В (8.52) учтено, что, согласно условию нормировки (8.50), стоящее в квадратных скобках выражение равно единице. Таким образом, концентрация n_0 бозонов в конденсированном состоянии, т.е. имеющих энергию $E = 0$, равна

$$n_0 = n \left[1 - \left(\frac{T}{T_0} \right)^{3/2} \right].$$

Замечание. Теоретически конденсация Бозе–Эйнштейна была предсказана Эйнштейном в 1925 году. Однако экспериментально конденсация Бозе–Эйнштейна впервые наблюдалась только в 1995 году в парах щелочноземельных металлов. Для этого атомы щелочноземельных металлов помещались в магнитные ловушки и охлаждались до температуры порядка 10^{-7} К. Существенного прогресса в экспериментальном изучении конденсата Бозе–Эйнштейна удалось достичь в 2004 году, когда был разработан метод удержания конденсата в оптических ловушках.

Ответ: $T_0 = \frac{3,31}{(2s+1)^{2/3}} \frac{\hbar^2}{mk} n^{2/3}$, $n_0 = n \left[1 - \left(\frac{T}{T_0} \right)^{3/2} \right]$.

Задача 8.2.9. Получить формулу Планка для спектральной плотности энергии $\rho_{\omega}(T)$, исходя из распределения Бозе–Эйнштейна.

Решение

Как уже отмечалось в задаче 8.2.4, химический потенциал фотонного газа равен нулю ($\mu = 0$). Энергия фотона $\varepsilon = \hbar\omega$. Для плотности состояний фотона в задаче 8.2.2 была получена формула (8.10):

$$\rho(\omega) = V \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3}.$$

Согласно (8.24), плотность вероятности $f(\omega)$ обнаружить фотон с частотой в интервале $(\omega, \omega + d\omega)$ равна

$$f(\omega) = \frac{\bar{n}(\omega)\rho(\omega)}{N} = \frac{1}{n} \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1}.$$

Спектральная плотность энергии $\rho_\omega(T)$ равна произведению энергии фотона $\varepsilon = \hbar\omega$ на концентрацию фотонов $nf(\omega)$ с частотой в интервале $(\omega, \omega + d\omega)$:

$$\rho_\omega(T) = n\hbar\omega f(\omega) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1}. \quad (8.53)$$

Замечание. Стоит отметить, что формула Планка (8.53) изначально была получена из других соображений (см. задачу 1.2.2), причем почти на четверть века раньше, чем распределение Бозе–Эйнштейна.

8.3. Короткие задачи

Задача 8.3.1. Найти плотность квантовых состояний для нерелятивистского электрона, находящегося в большом прямоугольном параллелепипеде объемом V , исходя непосредственно из нерелятивистского соотношения между кинетической энергией и импульсом: $E = p^2/(2m)$.

Решение

Как и при решении задачи 8.2.2, найдем число квантовых состояний электрона в интервале энергий $(E, E + dE)$, которому соответствует шаровой слой толщины dp . Для этого воспользуемся соотношениями:

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad \text{и} \quad dE = \frac{p}{m} dp,$$

откуда

$$dp = \sqrt{\frac{m}{2E}} dE.$$

Тогда число квантовых состояний в интервале энергий $(E, E + dE)$ равно

$$dn_s = (2s + 1)V \frac{4\pi p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3} = V \frac{\sqrt{2}m^{3/2}}{\pi^2\hbar^3} \sqrt{E} dE.$$

Здесь учтено, что для электрона $(2s + 1) = 2$. Окончательно, для плотности квантовых состояний нерелятивистского электрона получим:

$$\rho(E) = V \frac{\sqrt{2}m^{3/2}}{\pi^2\hbar^3} \sqrt{E},$$

что совпадает с выражением (8.9).

Ответ: .

Задача 8.3.2. Найти плотность квантовых состояний $\rho(\omega)$ фотона в вакууме, находящегося в бесконечно большом прямоугольном параллелепипеде объемом V , исходя непосредственно из соотношения между энергией и импульсом фотона: $E = \hbar\omega = pc$.

Решение

Найдем число квантовых состояний фотона в интервале частот $(\omega, \omega + d\omega)$, которому соответствует шаровой слой толщины dp . Для этого воспользуемся соотношениями:

$$p = \frac{\hbar}{c}\omega \quad \text{и} \quad dp = \frac{\hbar}{c}d\omega.$$

Тогда число квантовых состояний в интервале частот $(\omega, \omega + d\omega)$ равно

$$dn_s = (2s + 1)V \frac{4\pi p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3} = V \frac{\omega^2 d\omega}{\pi^2 c^3}.$$

Здесь учтено, что фотон в вакууме может иметь только две различные поляризации (см. замечания к задаче 8.2.2). Окончательно, для плотности квантовых состояний фотона получаем:

$$\rho(\omega) \equiv \frac{dn_s}{d\omega} = V \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3},$$

что совпадает с выражением (8.10).

Ответ: $\rho(\omega) = V \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3}.$

Задача 8.3.3. Найти зависимость среднего числа заполнения квантовых состояний \bar{n} от энергии ε для свободного газа фермионов вблизи энергии $\varepsilon = \mu$. Оценить ширину «размытия» $\Delta\varepsilon$ распределения Ферми–Дирака при низкой температуре $kT \ll \varepsilon_F$.

Решение

При низких температурах $kT \ll \varepsilon_F$ химический потенциал практически равен энергии Ферми $\mu \approx \varepsilon_F$, а распределение Ферми–Дирака

$$\bar{n}(\varepsilon) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\varepsilon - \mu}{kT}\right) + 1}$$

имеет вид ступеньки (см. рис. 8.1), слегка «размытой» в области энергий $\varepsilon \approx \mu \approx \varepsilon_F$. Раскладывая распределение Ферми–Дирака в ряд Тейлора вблизи точки $\varepsilon = \mu$, получим:

$$\begin{aligned} \bar{n}(\varepsilon) &= \bar{n}(\mu + (\varepsilon - \mu)) = \bar{n}(\mu) + \left. \frac{d\bar{n}}{d\varepsilon} \right|_{\varepsilon=\mu} (\varepsilon - \mu) + \dots = \\ &= \frac{1}{2} - \frac{1}{kT} \frac{\exp\left(\frac{\varepsilon - \mu}{kT}\right)}{\left[\exp\left(\frac{\varepsilon - \mu}{kT}\right) + 1\right]^2} \Bigg|_{\varepsilon=\mu} (\varepsilon - \mu) + \dots = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{\varepsilon - \mu}{2kT} \right] + \dots \quad (8.54) \end{aligned}$$

Линейное приближение (8.54) для $\bar{n}(\varepsilon)$ справедливо только вблизи точки $\varepsilon = \mu$. Однако при низких температурах $kT \ll \varepsilon_F$ его можно использовать для оценки ширины «размытия» распределения. Действительно, согласно формуле (8.54):

$$\bar{n}(\mu + 2kT) = 0 \quad \text{и} \quad \bar{n}(\mu - 2kT) = 1.$$

Отсюда ширина «размытия» распределения Ферми–Дирака равна $\Delta\varepsilon \approx 4kT$.

Ответ: $\bar{n}(\varepsilon) \approx \frac{1}{2} \left[1 - \frac{\varepsilon - \mu}{2kT} \right], \Delta\varepsilon \approx 4kT.$

Задача 8.3.4. Концентрация свободного нерелятивистского электронного (неполяризованного) газа равна n . Найти давление электронного газа P при нулевой температуре ($T = 0$ К).

Решение

Из первого начала термодинамики:

$$dE = TdS - PdV + \mu dN$$

следует, что давление газа P равно

$$P = - \left(\frac{\partial E}{\partial V} \right)_{S,N} = -N \left(\frac{\partial \bar{E}}{\partial V} \right)_{S,N}. \quad (8.55)$$

Подставляя в (8.55) среднюю энергию электронного газа (8.29), найденную в задаче 8.2.5, получим

$$P = -N \frac{\partial}{\partial V} \left(\frac{3}{5} \varepsilon_F \right) = -N \frac{\partial}{\partial V} \left(\frac{3}{5} \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2)^{2/3} \frac{N^{2/3}}{V^{2/3}} \right) = \frac{(3\pi^2)^{2/3} \hbar^2}{5m} n^{5/3}.$$

Или в более компактном виде:

$$P = \frac{2}{5} \varepsilon_F n.$$

Ответ: $P = \frac{(3\pi^2)^{2/3} \hbar^2}{5m} n^{5/3} = \frac{2}{5} \varepsilon_F n.$

8.4. Задачи для самостоятельного решения

Задача 8.4.1. Частица находится в одномерной потенциальной яме шириной L (см. задачу 8.2.1). На волновую функцию частицы наложены следующие граничные условия:

$$\alpha_1 \psi(0) + \beta_1 \psi'(0) = 0 \quad \text{и} \quad \alpha_2 \psi(L) + \beta_2 \psi'(L) = 0,$$

где α_1 , α_2 , β_1 и β_2 – вещественные постоянные. Считая, что ширина ямы L стремится к бесконечности, найти объем Δp_x одного квантового состояния в импульсном пространстве.

Ответ: $\Delta p_x = \frac{2\pi\hbar}{L}.$

Задача 8.4.2. Показать, что при условии $(\epsilon - \mu) \gg kT$ распределения Ферми–Дирака и Бозе–Эйнштейна переходят в распределение Больцмана.

Задача 8.4.3. Сколько процентов частиц в идеальном нерелятивистском электронном газе при $T = 0$ К имеют кинетическую энергию, превышающую треть от максимальной?

Ответ: $1 - 3^{-3/2} \approx 80,7\%$.

Задача 8.4.4. Поверхностная концентрация свободного двумерного нерелятивистского электронного (неполяризованного) газа равна n_2 . Найти энергию $\epsilon_F^{(2D)}$ и импульс $p_F^{(2D)}$ Ферми электронного газа, а также его среднюю кинетическую энергию $\bar{E}^{(2D)}$ при нулевой температуре ($T = 0$ К).

Ответ: $\epsilon_F^{(2D)} = \frac{\pi \hbar^2}{m} n_2$, $p_F^{(2D)} = \hbar \sqrt{2\pi n_2}$, $\bar{E}^{(2D)} = \frac{1}{2} \epsilon_F^{(2D)}$.

Задача 8.4.5. Линейная концентрация свободного одномерного нерелятивистского электронного (неполяризованного) газа равна n_1 . Найти энергию $\epsilon_F^{(1D)}$ и импульс $p_F^{(1D)}$ Ферми электронного газа, а также его среднюю кинетическую энергию $\bar{E}^{(1D)}$ при нулевой температуре ($T = 0$ К).

Ответ: $\epsilon_F^{(1D)} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m} n_1^2$, $p_F^{(1D)} = \hbar \frac{\pi n_1}{2}$, $\bar{E}^{(1D)} = \frac{1}{3} \epsilon_F^{(1D)}$.

Задача 8.4.6. Концентрация свободного нерелятивистского электронного газа равна n . Будем считать, что электронный газ поляризован, т.е. концентрация n_\uparrow электронов с проекцией спина $s_z = \hbar/2$ не равна концентрации n_\downarrow электронов с проекцией спина $s_z = -\hbar/2$, при этом, конечно же, $n = n_\uparrow + n_\downarrow$. Степень поляризации электронного газа определим как $\eta = |n_\uparrow - n_\downarrow| / (n_\uparrow + n_\downarrow)$. Найти среднюю энергию \bar{E} электронного газа и его давление P при нулевой температуре ($T = 0$ К).

Ответ: $\bar{E} = \frac{3\hbar^2}{10m} (3\pi^2 n)^{2/3} \vartheta$, $P = \frac{\hbar^2}{5m} (3\pi^2)^{2/3} n^{5/3} \vartheta$,

$$\text{где } \vartheta = \frac{1}{2} \left[(1+\eta)^{5/3} + (1-\eta)^{5/3} \right].$$

Задача 8.4.7. Показать, что при температуре, много большей температуры вырождения ($kT \gg \varepsilon_F$), теплоемкость нерелятивистского электронного газа стремится к классическому пределу $C_V = \frac{3}{2} R$.

Задача 8.4.8 (см. [2] 9.4 и 9.7). Рассматривая электронный газ в металле как идеальный электронный газ, показать, что отношение коэффициента теплопроводности χ к удельной проводимости σ прямо пропорционально температуре:

$$\frac{\chi}{\sigma} = \alpha T \quad (\text{закон Видемана-Франца}),$$

где постоянная α называется числом Лоренца. Найти α .

$$\text{Ответ: } \alpha = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k}{e} \right)^2 \approx 2,44 \cdot 10^{-8} \frac{\text{Вт} \cdot \text{Ом}}{\text{К}^2}.$$

Задача 8.4.9. Доказать асимптотическую формулу:

$$\int_0^{\infty} \frac{F(\varepsilon) d\varepsilon}{\exp\left(\frac{\varepsilon - \mu}{kT}\right) + 1} = \int_0^{\mu} F(\varepsilon) d\varepsilon + \frac{\pi^2}{6} (kT)^2 F'(\mu) + \dots,$$

справедливую при $kT \ll \varepsilon_F$.

Задача 8.4.10. При сжатии электронного газа средняя энергия электронов может стать значительно больше их энергии покоя $\bar{\varepsilon} \gg mc^2$. В этом случае говорят об ультрарелятивистском электронном газе. Энергия ультрарелятивистской частицы связана с её импульсом соотношением $\varepsilon = pc$. Концентрация электронного газа равна n . Найти энергию Ферми ε_F , среднюю энергию $\bar{\varepsilon}$ и давление P ультрарелятивистского электронного газа при нулевой температуре ($T = 0$ К).

$$\text{Ответ: } \varepsilon_F = \hbar c \left(3\pi^2 n \right)^{1/3}, \quad \bar{\varepsilon} = \frac{3}{4} \varepsilon_F, \quad P = \frac{1}{4} \varepsilon_F n = \frac{1}{3} \bar{\varepsilon} n.$$

Задача 8.4.11. Концентрация свободного нерелятивистского (неполяризованного) газа бозонов массой $m > 0$ со спином s равна n . Найти среднюю энергию \bar{E} , молярную теплоемкость C_V и давление P бозе-газа при температуре ниже температуры T_0 конденсации Бозе–Эйнштейна ($T \leq T_0$).

Ответ: $\bar{E} = 0,77kT \left(\frac{T}{T_0} \right)^{3/2}$, $C_V = \frac{5}{2} R \left(\frac{\bar{E}}{kT} \right) = 1,93R \left(\frac{T}{T_0} \right)^{3/2}$,

$$P = \frac{2}{3} \bar{E}n \approx 0,51nkT \left(\frac{T}{T_0} \right)^{3/2}, \text{ где } T_0 = \frac{3,31}{(2s+1)^{2/3}} \frac{\hbar^2}{mk} n^{2/3}.$$

Замечание. При $T = T_0$ величины \bar{E} , C_V и P непрерывны. Можно показать (см. [1] стр. 215), что при температуре $T = T_0$ производная $(\partial C_V / \partial T)_V$ испытывает скачок. В этом смысле переход бозе-газа в конденсированное состояние можно назвать фазовым переходом *третьего* рода. Однако при наличии даже очень слабого взаимодействия между бозонами фазовый переход становится переходом второго рода.

Список литературы

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика: Учеб. пособ.: Для вузов. В 10 т. Т. V. Статистическая физика. Ч. I. – 5-е изд., стереот. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2010. – 616 с.
2. Миронова Г.А., Брандт Н.Н., Салецкий А.М., Поляков О.П., Трубочев О.О. Введение в квантовую физику в вопросах и задачах. Уч. пособие. – М.: Физический факультет МГУ, 2012. – 320 с.

ГЛАВА 9 КВАЗИЧАСТИЦЫ В ТВЕРДОМ ТЕЛЕ

9.1. Теоретический материал

1. Классические колебания в кристалле. Кристалл, состоящий из N атомов, имеет в общем случае $3N - 6 \approx 3N$ колебательных степеней свободы, каждая из которых характеризуется частотой ω_i и волновым вектором \mathbf{k}_i . Зависимость частоты от волнового вектора $\omega = \omega(\mathbf{k})$ называется *законом дисперсии*, а величина

$$v_{\text{гр}} = \left| \frac{d\omega}{d\mathbf{k}} \right|$$

групповой скоростью бегущих в кристалле волн. При этом одна мода колебаний занимает в пространстве волновых векторов объем

$$\Delta k = \frac{(2\pi)^3}{V},$$

где V – объем кристалла.

Вследствие наличия у кристалла трансляционной инвариантности, одной и той же моде колебаний соответствует бесконечно много волновых векторов. Среди волновых векторов, соответствующих данной моде колебаний, можно выделить один с минимальным значением модуля. Такие волновые векторы, соответствующие всем физически различным модам колебаний, занимают в пространстве волновых векторов объем, называемый *первой зоной Бриллюэна*.

В кристалле всегда существуют моды колебаний, для которых при малых значениях волнового числа закон дисперсии является линейным

$$\omega \approx c_{\text{зв}} k,$$

где $c_{\text{зв}}$ – скорость распространения звука в кристалле. Такие моды колебаний называются *акустическими*. При этом акустические моды могут быть как *продольными*, так и *поперечными*. Скорости продольных и поперечных волн в общем случае различны.

2. Переход к квантовому описанию колебаний в кристалле. Фононы. Бегущим в кристалле волнам можно сопоставить квазичастицы *фононы* по следующим правилам. Энергия ε_i и

импульс \mathbf{p}_i фонона связаны с частотой ω_i и волновым вектором \mathbf{k}_i бегущей волны соотношениями:

$$\varepsilon_i = \hbar\omega_i \quad \text{и} \quad \mathbf{p}_i = \hbar\mathbf{k}_i.$$

Из линейности закона дисперсии акустических волн следует, что масса фонона равна нулю:

$$m_{\text{ф}} = 0.$$

Объем одного квантового состояния фонона в импульсном пространстве равен

$$\Delta p = \frac{(2\pi\hbar)^3}{V}.$$

Амплитуда акустических волн может быть сколь угодно большой. Это означает, что в одном квантовом состоянии может находиться несколько фононов, т.е. фононы являются бозонами. Среднее число фононов в каждом квантовом состоянии определяется распределением Бозе-Эйнштейна с равным нулю химическим потенциалом:

$$\bar{n}_i = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega_i}{k_{\text{B}}T}\right) - 1}.$$

Постоянную Больцмана будем обозначать k_{B} , чтобы не путать её с волновым числом.

Вводя нормальные координаты q_i , можно в первом приближении привести систему уравнений движения атомов в твердом теле к виду:

$$\frac{d^2 q_i}{dt^2} + \omega_i^2 q_i = 0, \quad i = 1, 2, \dots, 3N.$$

Каждое из этих уравнений представляет собой уравнение гармонического осциллятора, поэтому полная энергия кристалла равна

$$E = \sum_{i=1}^{3N} \hbar\omega_i \left(\frac{1}{2} + n_i \right) = \sum_{i=1}^{3N} \frac{\hbar\omega_i}{2} + \sum_{i=1}^{3N} \hbar\omega_i n_i, \quad (9.1)$$

где $n_i = 0, 1, 2, 3, \dots$ – неотрицательные целые числа, которые в данном случае можно интерпретировать как числа фононов с энергий $\hbar\omega_i$ в твердом теле. В выражении (9.1) первое слагаемое не зависит от температуры тела и называется *энергией нулевых*

колебаний. Второе слагаемое зависит от температуры, поскольку средние значения чисел n_i определяются распределением Бозе-Эйнштейна; оно отвечает за тепловую энергию твердого тела. При низких температурах ($\hbar\omega_i \gg k_B T$) среднее число \bar{n}_i фононов с энергией $\hbar\omega_i$ близко к нулю. Однако при $\hbar\omega_i \approx k_B T$ среднее число \bar{n}_i фононов становится порядка единицы, т.е. в твердом теле появляются фононы с частотой $\hbar\omega_i$. При этом говорят, что в твердом теле возбуждаются колебания на частоте ω_i . Температура, при которой возбуждаются колебания на всех возможных частотах, называется температурой Дебая. Температура Дебая определяется соотношением:

$$k_B T_D = \hbar\omega_{\max},$$

где ω_{\max} — максимально возможная частота собственных колебаний в твердом теле.

3. Уравнение Шредингера в матричной форме. При решении задач часто бывает удобно записать уравнение Шредингера

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

в матричном виде. Для этого разложим волновую функцию $\Psi(x, t) = \langle x | \Psi \rangle$ по ортонормированным волновым функциям $\chi_m(x) = \langle x | m \rangle$:

$$\Psi(x, t) = \langle x | \Psi \rangle = \sum_m \langle x | m \rangle \langle m | \Psi \rangle = \sum_m a_m(t) \chi_m(x),$$

где $a_m(t) = \langle m | \Psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \chi_m^*(x) \Psi(x, t) dx$ — амплитуда вероятности

обнаружить частицу в состоянии с волновой функцией $\chi_m(x)$. Подставляя $\Psi(x, t)$ в уравнение Шредингера, умножая его слева на $\chi_n^*(x)$ и интегрируя по x , получим уравнение Шредингера в матричной форме:

$$i\hbar \frac{\partial a_n}{\partial t} = \sum_m H_{nm} a_m,$$

где числа $H_{nm} = \int_{-\infty}^{+\infty} \chi_n^*(x) \hat{H} \chi_m(x) dx$ называются *матричными элементами* гамильтониана.

4. Теорема Блоха. Если частица находится в периодическом потенциале кристаллической решетки, то имеет место *теорема Блоха*:

- Волновые функции частицы в периодическом потенциале имеют вид произведения функции плоской волны $\exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})$ на функцию $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, которая является периодической:

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}.$$

Любая волновая функция частицы в кристалле может быть разложена по функциям $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, т.е. представлена в виде:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega(\mathbf{k})t)},$$

где $\omega = \omega(\mathbf{k})$ – *закон дисперсии* частицы в кристалле.

5. Электроны в кристалле. Для простоты будем говорить об электроны в кристалле с кубической решеткой. Электрон в кристалле не является свободным, он взаимодействует как с ионами в узлах решетки, так и с другими электронами. Однако в длинноволновом приближении $ka \ll 1$ (a – постоянная решетки) закон дисперсии электрона и его групповую скорость можно записать в виде:

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{\text{эфф}}} \quad \text{и} \quad \mathbf{v}_{\text{гр}} = \frac{\hbar}{m_{\text{эфф}}} \mathbf{k}.$$

Таким образом, электрон в кристалле создает коллективное возбуждение – квазичастицу, которая движется в кристалле как свободная нерелятивистская частица с *эффективной массой* $m_{\text{эфф}}$ и спином $s = 1/2$. Эти квазичастицы в кристалле можно рассматривать как газ свободных нерелятивистских электронов (см. **Главу 8**), помня при этом, что массу электрона m_e нужно заменить на его эффективную массу $m_{\text{эфф}}$.

6. Модель Гейзенберга. Если атомы в кристалле обладают ненулевым спином \mathbf{s} , то между соседними атомами кристалла появляется дополнительное взаимодействие, обусловленное наличием у атомов магнитных моментов. Согласно *модели Гейзенберга*,

потенциальную энергию взаимодействия магнитных моментов двух атомов можно записать в виде:

$$U = -2 \frac{J}{\hbar^2} (\mathbf{s}_i \mathbf{s}_j),$$

где энергия U называется *обменной энергией*, а величина J – *обменным интегралом*. Кристаллы, для которых $J > 0$, при низких температурах являются ферромагнетиками, а кристаллы, для которых $J < 0$, – антиферромагнетиками. В одномерном случае гамильтониан Гейзенберга имеет вид:

$$H = -\frac{2J}{\hbar^2} \sum_{n=1}^N \mathbf{s}_n \mathbf{s}_{n+1}.$$

В задачах мы будем для простоты считать, что спин каждого атома $s = 1/2$. Это упрощение не изменит сути полученных результатов.

7. Магноны. При температуре существенно ниже температуры Кюри в ферромагнетике могут распространяться *спиновые волны*. Для кубического кристалла с параметром решетки a в длинноволновом приближении ($ka \ll 1$) закон дисперсии спиновых волн и их групповая скорость имеют вид:

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{\text{эфф}}} \quad \text{и} \quad \mathbf{v}_{\text{гр}} = \frac{\hbar}{m_{\text{эфф}}} \mathbf{k}.$$

Поэтому спиновой волне можно поставить в соответствие квазичастицу *магنون*, которая движется в кристалле как свободная нерелятивистская частица с *эффективной массой* $m_{\text{эфф}}$ и спином $s = 0$. В отличие от электронов, магноны являются бозонами и подчиняются статистике Бозе–Эйнштейна:

$$\bar{n}_i = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega_i}{k_B T}\right) - 1}.$$

Химический потенциал μ магнона равен нулю.

9.2. Задачи с решениями

Задача 9.2.1. Рассмотрим простейшую модель твердого тела. Пусть на проволоку длиной L нанизаны N одинаковых шариков, которые могут перемещаться по проволоке без трения. Масса

одного шарика m . Шарик соединен одинаковыми пружинами, характеризующихся жесткостью β . Длина a недеформированной пружины совпадает со средним расстоянием между шариками L/N . Для имитации бесконечно длинной цепочки проволока соединена в кольцо, а первый и последний шарик соединены такой же пружинкой, как и все остальные. Считая что $N \gg 1$, найти закон дисперсии $\omega(k)$ и групповую скорость $v_{гр}$ бегущих в колечке волн.

Решение

Из условия $N \gg 1$ следует, что длина кольца $L = Na$ много больше, чем среднее расстояние между шариками a , поэтому можно считать, что любые три соседних шарика лежат на одной прямой. Введем координату x вдоль проволоки. Поскольку нас не интересует поступательное движение всей цепочки из шариков вдоль проволоки, будем считать, что каждый шарик колеблется около своего положения равновесия $x_{0,n} = an$, где $n = 1, 2, \dots, N$. Смещение n -го шарика из положения равновесия будем обозначать $\xi_n(t) = x_n(t) - an$.

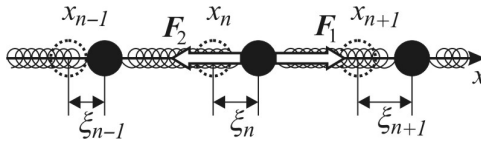


Рис. 9.1. Фрагмент цепочки из одинаковых шариков.

Рассмотрим три соседних шарика с номерами $n-1$, n и $n+1$ (см. рис. 9.1). Для определенности будем считать, что пружинки между этими тремя шариками в некоторый момент времени растянуты, т.е. $\xi_{n+1} > \xi_n > \xi_{n-1}$. Тогда, согласно закону Гука, действующая на n -й шарик со стороны $(n+1)$ -го сила равна

$$F_{1,x} = \beta(l - l_0) = \beta[a(n+1) + \xi_{n+1} - an - \xi_n - a] = \beta(\xi_{n+1} - \xi_n), \quad (9.2)$$

где $l = (a(n+1) + \xi_{n+1}) - (an + \xi_n)$ — длина растянутой пружины, $l_0 = a$ — длина нерастянутой пружины. Аналогично, действующая на n -й шарик со стороны $(n-1)$ -го сила равна

$$F_{2,x} = -\beta[an + \xi_n - a(n-1) - \xi_{n-1} - a] = -\beta(\xi_n - \xi_{n-1}). \quad (9.3)$$

Тогда уравнение движения n -ого шарика имеет вид:

$$m \frac{d^2}{dt^2} (x_{0,n} + \xi_n) = F_{1,x} + F_{2,x}. \quad (9.4)$$

Учитывая, что $x_{0,n} = an = \text{const}$, и подставляя в (9.4) выражения (9.2) и (9.3), получим дифференциальное уравнение:

$$m \ddot{\xi}_n = \beta (\xi_{n+1} - 2\xi_n + \xi_{n-1}). \quad (9.5)$$

Его решение будем искать в виде бегущей волны:

$$\xi_n = A e^{i(\omega t - kx_n)} = A e^{i(\omega t - kan)}. \quad (9.6)$$

Тогда

$$\xi_{n-1} = \xi_n e^{ika}, \quad \xi_{n+1} = \xi_n e^{-ika}, \quad \ddot{\xi}_n = -\omega^2 \xi_n. \quad (9.7)$$

Подставляя (9.6) и (9.7) в уравнение (9.5), получим:

$$-\omega^2 m = \beta (e^{ika} - 2 + e^{-ika}) = -4\beta \sin^2 \left(\frac{ka}{2} \right),$$

откуда для закона дисперсии бегущих волн имеем:

$$\omega(k) = 2 \sqrt{\frac{\beta}{m}} \left| \sin \left(\frac{ka}{2} \right) \right|. \quad (9.8)$$

Групповая скорость бегущих волн равна

$$v_{\text{гр}} = \left| \frac{d\omega}{dk} \right| = a \sqrt{\frac{\beta}{m}} \left| \cos \left(\frac{ka}{2} \right) \right|. \quad (9.9)$$

Замечания

1. В предельном случае длинных волн $|k|a \ll 1$ закон дисперсии (9.8) переходит в закон дисперсии акустических волн в сплошной среде $\omega(k) = c_{\text{зв}} |k|$,

где $c_{\text{зв}} = a \sqrt{\beta/m}$ — скорость звука. При этом групповая скорость (9.9) совпадает с $c_{\text{зв}}$.

2. Волновое число k не может быть сколь угодно большим. Действительно, как видно из рис. 9.2, минимальная длина

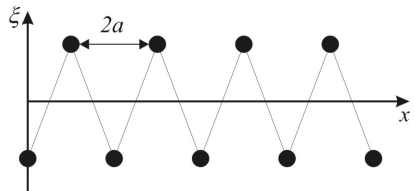


Рис. 9.2. Смещение шариков из положения равновесия при минимально возможной длине волны.

волны равна $2a$, что соответствует ситуации, когда соседние шарики смещаются в противоположных направлениях. Поэтому

$$k_{\max} = \frac{2\pi}{\lambda_{\min}} = \frac{\pi}{a}.$$

Таким образом, все физически различные состояния цепочки лежат в интервале волновых векторов $k \in \left[-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right]$, называемом *первой зоной Бриллюэна*. На рис. 9.3 и 9.4 показаны закон дисперсии $\omega(k)$ и групповая скорость $v_{\text{гр}}$ акустических волн в первой зоне Бриллюэна.

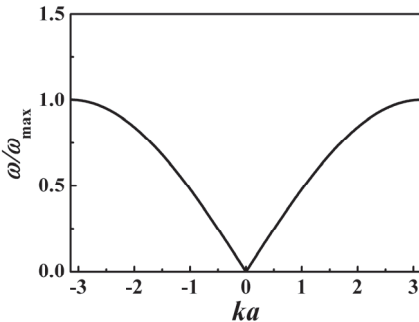


Рис. 9.3. Закон дисперсии акустических волн.

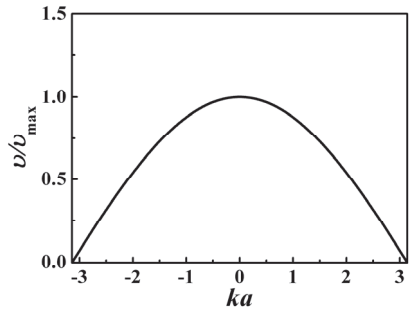


Рис. 9.4. Групповая скорость акустических волн.

3. Внутри первой зоны Бриллюэна волновой вектор может принимать только дискретные значения. Поскольку по условию задачи цепочка из шариков соединена в колечко, то на смещения шариков должно быть наложено периодическое граничное условие: $\xi(x) = \xi(x + L)$. Подставляя в него ξ в виде (9.6), получим уравнение $e^{ikL} = 1$. Решением этого уравнения являются волновые векторы

$$k_n = \frac{2\pi}{L} n,$$

где n – целое число. В первой зоне Бриллюэна число n принимает ровно N различных значений от $-N/2$ до $N/2$. Разность между ближайшими значениями волнового вектора $\Delta k = 2\pi/L$ можно интерпретировать как объем одной бегущей волны в пространстве волновых векторов.

4. Условие $ka = \pm\pi$, выполняющееся на границах первой зоны Бриллюэна, совпадает с условием отражения волн Вульфа–Брегга, поэтому на границах первой зоны Бриллюэна образуются стоячие волны, групповая скорость которых равна нулю (см. рис. 9.4).

$$\text{Ответ: } \omega(k) = 2\sqrt{\frac{\beta}{m}} \left| \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \right|, \quad v_{\text{гр}} = a\sqrt{\frac{\beta}{m}} \left| \cos\left(\frac{ka}{2}\right) \right|.$$

Задача 9.2.2. Рассмотреть задачу 9.2.1, считая, что массы m_1 шариков с четными номерами и массы m_2 шариков с нечетными номерами различаются. Общее число шариков N – четное. Шарики соединены одинаковыми пружинами с жесткостью β . Найти закон дисперсии $\omega(k)$ для бегущих волн.

Решение

Согласно условию задачи, массы атомов с номерами $2n$ равны m_1 , а массы атомов с номерами $2n+1$ равны m_2 . Как и в задаче 9.2.1, получим систему уравнений:

$$m_1 \ddot{\xi}_{2n} = \beta(\xi_{2n+1} - 2\xi_{2n} + \xi_{2n-1}), \quad (9.10a)$$

$$m_2 \ddot{\xi}_{2n+1} = \beta(\xi_{2n+2} - 2\xi_{2n+1} + \xi_{2n}), \quad (9.10б)$$

Будем искать решение системы уравнений (9.10a) и (9.10б) в виде бегущих волн:

$$\xi_{2n} = Ae^{i(\omega t - 2nka)} \quad \text{и} \quad \xi_{2n+1} = Be^{i(\omega t - (2n+1)ka)}. \quad (9.11)$$

Тогда

$$\begin{aligned} \xi_{2n-1} &= Be^{i(\omega t - (2n-1)ka)}, \quad \xi_{2n+2} = Ae^{i(\omega t - (2n+2)ka)}, \\ \ddot{\xi}_{2n} &= -\omega^2 Ae^{i(\omega t - 2nka)}, \quad \ddot{\xi}_{2n+1} = -\omega^2 Be^{i(\omega t - (2n+1)ka)}. \end{aligned} \quad (9.12)$$

Подставляя (9.11) и (9.12) в уравнения (9.10a) и (9.10б), получим систему линейных алгебраических уравнений:

$$-\omega^2 Am_1 = \beta \left(Be^{-ika} - 2A + Be^{ika} \right) = 2\beta B \cos(ka) - 2\beta A,$$

$$-\omega^2 Bm_2 e^{-ika} = \beta \left(Ae^{-2ika} - 2Be^{-ika} + A \right) = [2\beta A \cos(ka) - 2\beta B] e^{-ika},$$

которую удобно записать в матричном виде:

$$\begin{pmatrix} 2\beta - \omega^2 m_1 & -2\beta \cos(ka) \\ -2\beta \cos(ka) & 2\beta - \omega^2 m_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (9.13)$$

Однородная система линейных уравнений (9.13) всегда имеет тривиальное решение $A = B = 0$, при этом все шарики находятся в положениях равновесия, и никаких бегущих волн нет. Чтобы система уравнений (9.13) имела нетривиальное решение необходимо, чтобы выполнялось условие:

$$\det \begin{vmatrix} 2\beta - \omega^2 m_1 & -2\beta \cos(ka) \\ -2\beta \cos(ka) & 2\beta - \omega^2 m_2 \end{vmatrix} = 0.$$

Раскрывая определитель, получим квадратное уравнение относительно ω^2 :

$$m_1 m_2 (\omega^2)^2 - 2\beta(m_1 + m_2)\omega^2 + 4\beta^2 \sin^2(ka) = 0.$$

Решая его, получим:

$$\omega_{\pm}^2 = \beta \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) \pm \beta \sqrt{\left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right)^2 - \frac{4 \sin^2(ka)}{m_1 m_2}}. \quad (9.14)$$

Частоты ω_+ и ω_- соответствуют двум различным модам колебаний. Чтобы выяснить их физический смысл рассмотрим предельный случай длинных волн $ka \ll 1$. Из выражения (9.14) получим:

$$\omega_+ = \sqrt{2\beta \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right)} \quad \text{и} \quad \omega_- = a \sqrt{\frac{2\beta}{m_1 + m_2}} k. \quad (9.15)$$

Рассмотрим теперь одно из уравнений системы (9.13), например,

$$(2\beta - \omega^2 m_1)A - 2\beta \cos(ka)B = 0.$$

При $ka \ll 1$

$$\frac{A}{B} = \frac{2\beta}{2\beta - \omega^2 m_1}. \quad (9.16)$$

Подставляя в (9.16) частоты (9.15), найдем

$$\left(\frac{A}{B} \right)_+ = -\frac{m_2}{m_1} \quad \text{и} \quad \left(\frac{A}{B} \right)_- = 1.$$

Это означает, что мода колебаний « \rightarrow » соответствует смещению соседних шариков в одну сторону, причем закон дисперсии

$\omega_- \sim k$ характерен для звуковых волн. Поэтому мода «-» называется *акустической* модой колебаний, а зависимость $\omega_-(k)$ – *акустической ветвью* закона дисперсии бегущих волн. Отметим, что при $m_1 = m_2$ скорость акустических волн

$$c_{зв} = a \sqrt{\frac{2\beta}{m_1 + m_2}}$$

совпадает со скоростью звука, найденной в **задаче 9.2.1**.

Мода колебаний «+» соответствует смещению соседних шариков в противоположные стороны. Если шарики с четными номерами имеют электрический заряд q , а шарики с нечетными номерами – заряд $-q^*$, то каждая пара соседних шариков представляет собой электрический диполь, дипольный момент которого меняется с частотой ω_+ . Если на такую цепочку будет падать электромагнитная волна, частота которой совпадает с ω_+ , то она будет поглощаться. Таким образом, частота ω_+ может быть определена экспериментально по спектру поглощения электромагнитных волн. Поэтому мода «+» называется *оптической* модой колебаний, а зависимость $\omega_+(k)$ – *оптической ветвью* закона дисперсии бегущих волн.

Замечание. Рассматриваемая нами цепочка из шариков имеет период $2a$, что в два раза больше, чем у цепочки в **задаче 9.2.1**, поэтому для нашей цепочки первая зона Бриллюэна в два раза меньше, чем в **задаче 9.2.1**, т.е. $k \in \left[-\frac{\pi}{2a}, \frac{\pi}{2a}\right]$. Считая для определенности, что $m_1 > m_2$, найдем из (9.14) частоты ω_{\pm} на границах первой зоны Бриллюэна:

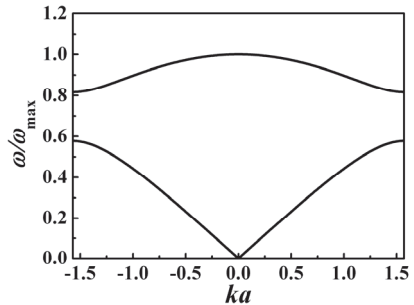


Рис. 9.5. Закон дисперсии акустических (нижняя ветвь) и оптических (верхняя ветвь) волн при $m_1 = 2m_2$.

* Цепочка в целом должна быть электрически нейтральна, поскольку мы рассматриваем модель кристалла.

$$\omega_+ = \sqrt{\frac{2\beta}{m_2}} \quad \text{и} \quad \omega_- = \sqrt{\frac{2\beta}{m_1}}.$$

Зависимость (9.14) в первой зоне Бриллюэна представлена на рис. 9.5. Видно, что существует *запрещенная зона*, т.е. интервал частот, которому не соответствует ни одна бегущая волна.

Ответ:
$$\omega_{\pm}^2 = \beta \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) \pm \beta \sqrt{\left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right)^2 - \frac{4 \sin^2(ka)}{m_1 m_2}}.$$

Задача 9.2.3. Оценить температуру Дебая T_D для акустических фононов одной поляризации, если известна скорость звука $c_{зв}$ в кристалле и концентрация атомов n . Оценить температуру Дебая для свинца, если известно, что плотность свинца $\rho = 11.3 \text{ г/см}^3$, молярная масса $M = 207,2 \text{ г/моль}$, скорость звука $c_{зв} = 1320 \text{ м/с}$.

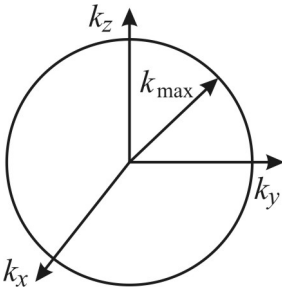


Рис. 9.6. Сфера в пространстве волновых векторов.

Решение

Температура Дебая определяется соотношением:

$$k_B T_D = \hbar \omega_{\max}. \quad (9.17)$$

Будем считать, что закон дисперсии акустических фононов остается линейным при любых значениях волнового числа, т.е.

$$\omega_{\max} = c_{зв} k_{\max}. \quad (9.18)$$

Найдем число квантовых состояний фононов в сфере радиуса k_{\max} в пространстве волновых векторов (см. рис. 9.6):

$$N_{\text{кв. сост.}} = \frac{V_{\text{сфера}}}{V_{1 \text{ кв. сост.}}} = \frac{\frac{4}{3} \pi k_{\max}^3}{\frac{(2\pi)^3}{V}} = \frac{k_{\max}^3}{6\pi^2} V, \quad (9.19)$$

где V – объем кристалла. Число квантовых состояний фонона с одной поляризацией, как мы видели на примере одномерного кристалла (см. задачу 9.2.1), совпадает с числом атомов, т.е. $N_{\text{кв. сост.}} = N$. Таким образом, из (9.19) получим:

$$k_{\max} = (6\pi^2 n)^{1/3}, \quad (9.20)$$

где $n = N/V$ – концентрация атомов в кристалле. Подставляя (9.20) в (9.18), а (9.18) в (9.17), получим:

$$T_D = \frac{\hbar}{k_B} c_{\text{зв}} (6\pi^2 n)^{1/3}. \quad (9.21)$$

Используем формулу (9.21) для оценки температуры Дебая свинца. Концентрация атомов свинца равна

$$n = \frac{\rho N_A}{M} = \frac{11,3 \cdot 6,02 \cdot 10^{23}}{207,2} = 3,3 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3} = 3,3 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3},$$

поэтому

$$\begin{aligned} T_D &= \frac{\hbar}{k_B} c_{\text{зв}} (6\pi^2 n)^{1/3} = \\ &= \frac{1,05 \cdot 10^{-34}}{1,38 \cdot 10^{-23}} 1322 \cdot (6\pi^2 \cdot 3,3 \cdot 10^{28})^{1/3} = 126 \text{ К}. \end{aligned} \quad (9.22)$$

Замечание. Для свинца температура Дебая равна 88 К, что качественно согласуется с полученной нами оценкой (9.22).

Ответ: $T_D = \frac{\hbar}{k_B} c_{\text{зв}} (6\pi^2 n)^{1/3}$, $T_D = 126 \text{ К}$.

Задача 9.2.4. Найти молярную теплоемкость C_V кристалла, считая, что все фононы в кристалле имеют одинаковую частоту ω . Рассмотреть предельные случаи $\hbar\omega \ll k_B T$ и $\hbar\omega \gg k_B T$.

Решение

В объеме кристалла, содержащем N_A атомов, существуют $3N_A$ различных квантовых состояний фононов, поскольку у фононов возможны три типа поляризации: две поперечные и одна продольная. По условию задачи, энергия фонона в любом из этих квантовых состояний равна $\hbar\omega$. Среднее число фононов в каждом состоянии определяется распределением Бозе-Эйнштейна:

$$\bar{n} = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) - 1}.$$

Поэтому средняя тепловая энергия кристалла, содержащего N_A атомов, равна

$$\bar{E} = 3N_A \frac{\hbar\omega}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) - 1}. \quad (9.23)$$

Дифференцируя (9.23) по температуре, найдем молярную теплоемкость кристалла:

$$C_V = 3R \left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)^2 \frac{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)}{\left[\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) - 1\right]^2}, \quad (9.24)$$

где $R = k_B N_A$ – универсальная газовая постоянная. Формула (9.24) была получена Эйнштейном в 1907 году.

При $\hbar\omega \ll k_B T$ разложим экспоненту в (9.24) в ряд Тейлора:

$$\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) = 1 + \frac{\hbar\omega}{k_B T} + \dots \quad \text{Тогда из (9.24) получим:}$$

$$C_V \approx 3R \left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)^2 \frac{1}{\left[1 + \frac{\hbar\omega}{k_B T} - 1\right]^2} = 3R,$$

т.е. при высоких температурах формула Эйнштейна переходит в классическую формулу Дюлонга и Пти.

При $\hbar\omega \gg k_B T$ можно пренебречь единицей в знаменателе выражения (9.24), тогда

$$C_V \approx 3R \left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)^2 \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right).$$

Видно, что согласно формуле Эйнштейна (9.24) при низких температурах теплоемкость убывает экспоненциально. Отметим, что такое поведение теплоемкости не совпадает с экспериментально наблюдаемым.

Замечание. При выводе формулы (9.24) Эйнштейн в 1907 году исходил из гипотезы Планка о квантовании энергии гармонического осциллятора, согласно которой $E_n = \hbar\omega n$, $n = 0, 1, 2, \dots$, предполагая, что все атомы кристалла можно рассматривать, как

одинаковые изотропные гармонические осцилляторы. Распределение Бозе–Эйнштейна и представления о фононах появились существенно позже.

$$\text{Ответ: } C_V = 3R \left(\frac{\hbar\omega}{k_B T} \right)^2 \frac{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)}{\left[\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) - 1 \right]^2},$$

$$C_V \approx 3R \text{ при } \hbar\omega \ll k_B T,$$

$$C_V \approx 3R \left(\frac{\hbar\omega}{k_B T} \right)^2 \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) \text{ при } \hbar\omega \gg k_B T.$$

Задача 9.2.5. Найти теплоемкость C_V кристалла, считая, что фононы имеют линейный закон дисперсии $\omega = c_{зв} k$. Рассмотреть случай малых температур $T \ll T_D$.

Решение

Считая закон дисперсии фононов линейным, найдем плотность состояний фононов с одной поляризацией. Сначала рассмотрим продольные фононы. Число квантовых состояний фононов с волновым числом в интервале $(k, k + dk)$ равно (см. рис. 9.7)

$$dn_s = \frac{V_{\text{сф. слой}}}{V_{\text{кв. сост.}}} = \frac{4\pi k^2 dk}{(2\pi)^3} V = \frac{\omega^2 d\omega}{2\pi^2 c_{\parallel}^3} V,$$

где c_{\parallel} – скорость продольных акустических волн, V – объем кристалла.

Число квантовых состояний продольных и поперечных фононов в интервале $(k, k + dk)$ равно

$$dn_s = \frac{3\omega^2 d\omega}{2\pi^2 \bar{c}^3} V, \quad (9.25)$$

где \bar{c} – средняя скорость звука в кристалле, определенная соотношением

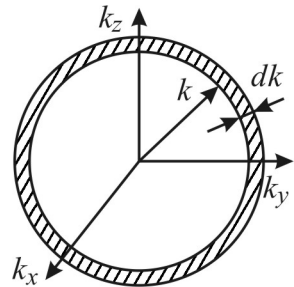


Рис. 9.7. Сферический слой в пространстве волновых векторов.

$$\frac{3}{c^3} = \frac{1}{c_{\parallel}^3} + \frac{2}{c_{\perp}^3}.$$

Согласно формуле (8.24), плотность вероятности обнаружить фотон с частотой в интервале $(\omega, \omega + d\omega)$ равна

$$f(\omega) = \frac{1}{N_{\phi}} \frac{dn_s}{d\omega} \bar{n} = \frac{3\omega^2}{2\pi^2 c^3} \frac{1}{n_{\phi}} \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) - 1}, \quad (9.26)$$

где \bar{n} – среднее число фононов в одном квантовом состоянии, определяемое распределением Бозе–Эйнштейна, а n_{ϕ} – концентрация фононов в кристалле. Тогда средняя энергия одного фонона равна

$$\bar{E}_{\phi} = \int_0^{\omega_{\max}} \hbar\omega f(\omega) d\omega.$$

Однако для вычисления теплоемкости кристалла нам понадобится средняя энергия в расчете на один атом: $\bar{E} = \bar{E}_{\phi} n_{\phi} / n$, где n – концентрация атомов. Используя (9.26), запишем:

$$\bar{E} = \frac{n_{\phi}}{n} \int_0^{\omega_{\max}} \hbar\omega f(\omega) d\omega = \frac{3\hbar}{2\pi^2 c^3} \frac{1}{n} \int_0^{\omega_{\max}} \frac{\omega^3}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) - 1} d\omega. \quad (9.27)$$

Делая в (9.27) замену переменных $\frac{\hbar\omega}{k_B T} \equiv x$, получим:

$$\bar{E} = \frac{3}{2\pi^2 c^3} \frac{1}{n} \frac{k_B^4 T^4}{\hbar^3} \int_0^{\frac{\hbar\omega_{\max}}{k_B T}} \frac{x^3}{e^x - 1} dx. \quad (9.28)$$

С учетом определения температуры Дебая ($T_D = \hbar\omega_{\max}/k_B$) и её оценки (9.21), полученной в задаче 9.2.3, перепишем (9.28) в виде:

$$\bar{E} = 9k_B \frac{T^4}{T_D^3} \int_0^{T_D/T} \frac{x^3}{e^x - 1} dx. \quad (9.29)$$

При низких температурах $T \ll T_D$ верхний предел интеграла в (9.29) можно заменить на ∞ . Такой интеграл нам хорошо знаком (см. задачу 1.2.4):

$$\int_0^{\infty} \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^4}{15}. \quad (9.30)$$

Подставляя (9.30) в (9.29), найдем среднюю энергию в расчете на один атом кристалла:

$$\bar{E} = \frac{3\pi^4}{5} k_B \frac{T^4}{T_D^3}. \quad (9.31)$$

Умножая (9.31) на число Авагадро и дифференцируя по температуре, получим молярную теплоемкость кристалла:

$$C_V = \frac{d(N_A \bar{E})}{dT} = \frac{3\pi^4}{5} R \frac{1}{T_D^3} \frac{dT^4}{dT} = \frac{12}{5} \pi^4 R \left(\frac{T}{T_D} \right)^3. \quad (9.32)$$

Таким образом, теплоемкость твердого тела при низких температурах пропорциональна кубу температуры (Дебай, 1912).

Замечание. Формула (9.32) справедлива для теплоемкости диэлектриков и полупроводников, однако теплоемкость металлов при низких температурах будет определяться суммой теплоемкости кристаллической решетки $C_V^{\text{реш}} \sim T^3$ и теплоемкости электронного газа $C_V^{\text{эл}} \sim T$ (см. задачу 8.2.7). Поэтому при низких температурах теплоемкость металла возрастает сначала пропорционально T , а потом – пропорционально T^3 .

Ответ: $C_V = \frac{12}{5} \pi^4 R \left(\frac{T}{T_D} \right)^3$.

Задача 9.2.6. Найти среднюю энергию \bar{E}_0 нулевых колебаний кристаллической решетки в расчете на один атом кристалла, считая, что фононы имеют линейный закон дисперсии $\omega = c_{\text{зв}} k$.

Решение

Согласно формуле (9.25), число квантовых состояний фононов в интервале частот $(\omega, \omega + d\omega)$ равно

$$dn_s = \frac{3\omega^2 d\omega}{2\pi^2 \bar{c}^3} V,$$

где \bar{c} – средняя скорость звука в кристалле, V – объем кристалла. Энергия нулевых колебаний в расчете на одно квантовое состояние, равна $\hbar\omega/2$, поэтому средняя энергия \bar{E}_0 нулевых колебаний кристаллической решетки в расчете на один атом кристалла, равна

$$\bar{E}_0 = \int_0^{\omega_{\max}} \frac{1}{N} \frac{dn_s}{d\omega} \frac{\hbar\omega}{2} d\omega = \frac{3}{4} \frac{\hbar}{\pi^2 \bar{c}^3} \frac{1}{n} \int_0^{\omega_{\max}} \omega^3 d\omega = \frac{3}{16} \frac{\hbar\omega_{\max}^4}{\pi^2 \bar{c}^3} \frac{1}{n}, \quad (9.33)$$

где n – концентрация атомов. Выражая концентрацию n из (9.21),

$$T_D = \frac{\hbar}{k_B} \bar{c} (6\pi^2 n)^{1/3}$$

(см. задачу 9.2.3) и подставляя её в (9.33), получим:

$$\bar{E}_0 = \frac{9}{8} kT_D.$$

Ответ: $\bar{E}_0 = \frac{9}{8} kT_D$.

Задача 9.2.7. Рассмотрим электрон в одномерном кристалле.

Для простоты будем считать, что

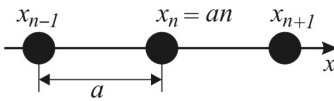


Рис. 9.8. Схематическое изображение одномерного кристалла.

(а) все атомы в кристалле одинаковы и находятся на одинаковом расстоянии a друг от друга (см. рис. 9.8);

(б) волновая функция стационарного состояния электрона в n -ом атоме известна и равна

$\chi_n(x) = \langle x | n \rangle$; вместо волновой функции электрона в атомной цепочке $\Psi(x, t) = \langle x | \Psi \rangle$ будем обсуждать амплитуды вероятности того, что электрон окажется вблизи n -го атома:

$$a_n(t) = \langle n | \Psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \chi_n^*(x) \Psi(x, t) dx;$$

(в) будем считать, что если электрон в данный момент времени находится вблизи n -го атома, то в следующий момент времени он

может либо остаться на том же месте, либо перейти к $(n+1)$ -му или $(n-1)$ -му атому; тогда матричные элементы гамильтониана H_{nm} будут иметь вид:

$$H_{nm} = \begin{cases} E_0, & \text{при } m = n, \\ -A, & \text{при } m = n \pm 1. \end{cases}$$

В остальных случаях $H_{nm} = 0$; коэффициент $E_0 > 0$ имеет смысл энергии электрона в изолированном атоме, а величина $A/\hbar > 0$ – частоты перехода электрона между соседними атомами.

Найти закон дисперсии $E(k)$ электрона в кристалле, групповую скорость $v_{гр}$ и эффективную массу $m_{эфф}$ электрона.

Решение

Запишем уравнение Шредингера в матричной форме:

$$i\hbar \frac{\partial a_n}{\partial t} = \sum_m H_{nm} a_m. \quad (9.34)$$

С учетом сделанных в условии задачи предположений, получим из (9.34) систему линейных дифференциальных уравнений для амплитуд вероятности $a_n(t)$:

$$i\hbar \frac{\partial a_n}{\partial t} = -A a_{n-1} + E_0 a_n - A a_{n+1}, \quad (9.35)$$

где n – целое число. Решение системы уравнений (9.35) будем искать в виде бегущих волн:

$$a_n(t) = C \exp\left[\frac{i}{\hbar}(p x_n - E t)\right], \quad (9.36)$$

где $x_n = a n$ – координата n -го атома, а C – произвольная постоянная. Тогда

$$\frac{\partial a_n}{\partial t} = -\frac{iE}{\hbar} a_n, \quad a_{n-1} = a_n \exp\left(-\frac{i p a}{\hbar}\right) \quad \text{и} \quad a_{n+1} = a_n \exp\left(\frac{i p a}{\hbar}\right). \quad (9.37)$$

Подставляя (9.36) и (9.37) в систему уравнений (9.35), получим:

$$E = E_0 - A \exp\left(\frac{i p a}{\hbar}\right) - A \exp\left(-\frac{i p a}{\hbar}\right) = E_0 - 2A \cos\left(\frac{p a}{\hbar}\right).$$

Абсолютное значение константы E_0 не имеет физического смысла, поэтому можно положить $E_0 = 2A$. Тогда закон дисперсии электрона в кристалле будет иметь вид:

$$E(p) = 2A \left[1 - \cos\left(\frac{pa}{\hbar}\right) \right].$$

Поскольку $p = \hbar k$, можно записать закон дисперсии в виде:

$$E(k) = 2A [1 - \cos(ka)]. \quad (9.38)$$

Дифференцируя (9.38) по k , найдем групповую скорость электрона:

$$v_{\text{гр}} = \left| \frac{d\omega}{dk} \right| = \frac{1}{\hbar} \left| \frac{dE}{dk} \right| = \frac{2Aa}{\hbar} |\sin(ka)|. \quad (9.39)$$

В силу периодичности расположения атомов в кристалле все физически различные состояния электрона содержатся в первой зоне Бриллюэна: $k \in \left[-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a} \right]$. Зависимости (9.38) и (9.39) в первой зоне Бриллюэна изображены на рис. 9.9 и 9.10.

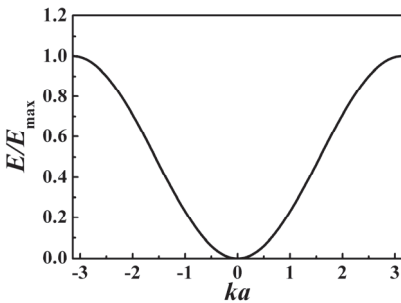


Рис. 9.9. Закон дисперсии электрона в одномерном кристалле.

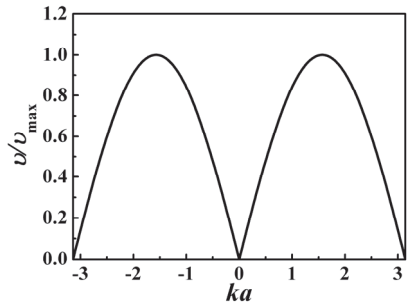


Рис. 9.10. Групповая скорость электрона в одномерном кристалле.

Чтобы найти эффективную массу электрона в кристалле рассмотрим длинноволновое приближение $ka \ll 1$. Из (9.39) видно, что групповая скорость электрона приближенно равна

$$v_{\text{гр}} = \frac{2Aa^2}{\hbar} |k|, \quad \text{откуда} \quad |k| = \frac{\hbar}{2Aa^2} v_{\text{гр}}. \quad (9.40)$$

Подставляя (9.40) в закон дисперсии (9.38), при $ka \ll 1$ получим:

$$E(k) = 2A[1 - \cos(ka)] \approx Ak^2a^2 = \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar^2}{2Aa^2} \right) v_{\text{гр}}^2. \quad (9.41)$$

С другой стороны, импульс электрона в том же приближении равен

$$p = \hbar k = \left(\frac{\hbar^2}{2Aa^2} \right) v_{\text{гр}}. \quad (9.42)$$

Из выражений (9.41) и (9.42) следует, что при $ka \ll 1$ электрон в кристалле ведет себя как свободная нерелятивистская частица, имеющая массу

$$m_{\text{эфф}} = \frac{\hbar^2}{2Aa^2}$$

и движущаяся со скоростью $v_{\text{гр}}$. Масса $m_{\text{эфф}}$ называется *эффективной массой* электрона в кристалле. Она может существенно отличаться от обычной массы электрона.

Ответ: $E(k) = 2A[1 - \cos(ka)], v_{\text{гр}} = \frac{2Aa}{\hbar} |\sin(ka)|,$

$$m_{\text{эфф}} = \frac{\hbar^2}{2Aa^2}.$$

Задача 9.2.8. В качестве простейшей модели одномерного кристалла рассмотрим электрон в периодическом потенциале

$U(x) = A \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(x - an)$, где $A = \text{const} < 0$. Найти закон дисперсии для электрона.

Решение

Будем искать решения с отрицательной энергией $E = -|E|$, тогда стационарное уравнение Шредингера будет иметь вид

$$\psi'' + \frac{2m|A|}{\hbar^2} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(x - an)\psi - \frac{2m|E|}{\hbar^2} \psi = 0. \quad (9.43)$$

Вводя обозначения $k_0 = \frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar}$ и $q = \frac{m|A|}{\hbar^2}$, запишем уравнение (9.43) в виде

$$\psi'' + 2q \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(x - an)\psi - k_0^2 \psi = 0. \quad (9.44)$$

С учетом теоремы Блоха будем искать решение уравнения (9.44) в виде:

$$\psi(x) = u(x)e^{ikx}, \quad (9.45)$$

где $u(x)$ – периодическая функция, т.е. $u(x+a) = u(x)$. Подставляя (9.45) в уравнение (9.44), получим:

$$u'' + 2iku' + 2q \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(x - an)u - (k_0^2 + k^2)u = 0. \quad (9.46)$$

В силу периодичности функции $u(x)$ достаточно найти решение уравнения (9.46) на отрезке $x \in \left[-\frac{a}{2}, \frac{a}{2}\right]$. Разобьем этот отрезок на три области: $(-a/2, -\varepsilon)$, $(-\varepsilon, \varepsilon)$ и $(\varepsilon, a/2)$. В первой и третьей областях все δ -функции равны нулю, и нужно решить уравнение

$$u'' + 2iku' - (k_0^2 + k^2)u = 0. \quad (9.47)$$

Решением уравнения (9.47) являются функции вида $\exp(-ikx \pm k_0x)$, поэтому в первой и третьей областях функция $u(x)$ имеет вид:

$$u_1(x) = (C_{11}e^{k_0x} + C_{12}e^{-k_0x})e^{-ikx}, \quad (9.48a)$$

$$u_3(x) = (C_{31}e^{k_0x} + C_{32}e^{-k_0x})e^{-ikx}. \quad (9.48б)$$

Поскольку функция $\exp(ikx)$ гладкая, то из непрерывности волновой функции $\psi(x)$ следует непрерывность функции $u(x)$. Поэтому функция $u(x)$ должна быть непрерывна в точке $x=0$. Устремляя ε к нулю, получим:

$$u_1(0) = u_2(0) = u_3(0). \quad (9.49)$$

Из (9.48a), (9.48б) и (9.49) следует, что

$$C_{11} + C_{12} = C_{31} + C_{32} = u_2(0). \quad (9.50)$$

Функция $u(x)$ должна иметь непрерывную первую производную в точках $x = \pm\varepsilon$. При $\varepsilon \rightarrow 0$ из (9.48a) и (9.48б) получим:

$$u_1'(-0) = k_0 (C_{11} - C_{12}) - ik (C_{11} + C_{12}) = u_2'(-0), \quad (9.51a)$$

$$u_3'(+0) = k_0 (C_{31} - C_{32}) - ik (C_{31} + C_{32}) = u_2'(+0). \quad (9.51б)$$

Рассмотрим уравнение (9.46) в области $x < |\varepsilon|$:

$$u_2'' + 2iku_2' + 2q\delta(x)u_2 - (k_0^2 + k^2)u_2 = 0. \quad (9.52)$$

Интегрируя уравнение (9.52) на интервале $x \in (-\varepsilon, \varepsilon)$ и устремляя ε к нулю, получим:

$$u_2'(+0) - u_2'(-0) + 2qu_2(0) = 0. \quad (9.53)$$

Подставляя в (9.53) граничные условия (9.50), (9.51a) и (9.51б), найдем:

$$k_0 (C_{31} - C_{32} - C_{11} + C_{12}) + 2q(C_{11} + C_{12}) = 0. \quad (9.54)$$

Из условия периодичности функции $u(x)$ следуют еще два граничных условия $u(a/2) = u(-a/2)$ и $u'(a/2) = u'(-a/2)$. Итак, из условия $u_3(a/2) = u_1(-a/2)$ получим:

$$C_{31}e^{k_0a} + C_{32} = (C_{11} + C_{12}e^{k_0a})e^{ika}, \quad (9.55)$$

а из условия $u_3'(a/2) = u_1'(-a/2)$ –

$$C_{31}e^{k_0a} - C_{32} = (C_{11} - C_{12}e^{k_0a})e^{ika}. \quad (9.56)$$

В результате имеем систему из четырех уравнений (9.50), (9.54), (9.55) и (9.56), линейных относительно коэффициентов C_{ij} .

Запишем её в виде:

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ 2q - k_0 & 2q + k_0 & k_0 & -k_0 \\ -e^{ika} & -e^{ika+k_0a} & e^{k_0a} & 1 \\ -e^{ika} & e^{ika+k_0a} & e^{k_0a} & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_{11} \\ C_{12} \\ C_{31} \\ C_{32} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (9.57)$$

Чтобы система уравнений (9.57) имела нетривиальное решение, необходимо, чтобы определитель матрицы, стоящей в левой части уравнения (9.57), был равен нулю. Раскрывая определитель, после алгебраических преобразований получим соотношение:

$$\cos(ka) = \operatorname{ch}(k_0a) - \frac{q}{k_0} \operatorname{sh}(k_0a), \quad (9.58)$$

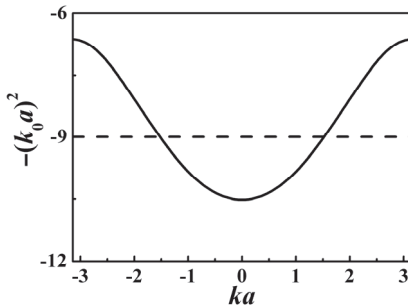


Рис. 9.11. Закон дисперсии электрона в периодическом потенциале из δ -функций при $qa = 3$. Пунктиром показан единственный уровень энергии в δ -образном потенциале.

которое представляет собой закон дисперсии электрона, записанный в неявной форме $f(E) = \cos(ka)$. Обратим внимание, что допустимыми с физической точки зрения энергиями являются только те энергии электрона, для которых $|f(E)| \leq 1$. Таким образом, единственный уровень энергии электрона в δ -образной яме (см. задачу 6.2.8) превращается в энергетическую зону, определяемую неравенством $|f(E)| \leq 1$. На рис.

9.11 в качестве примера изображена зависимость величины $E \cdot 2ma^2/\hbar^2 = -(k_0 a)^2$ от ka при $qa = 3$. Для сравнения на том же рисунке штриховой линией отмечен уровень энергии частицы в изолированном δ -потенциале, вычисленный по формуле (6.38).

Ответ: $\cos(ka) = \text{ch}(k_0 a) - \frac{q}{k_0} \text{sh}(k_0 a)$, где $k_0 = \frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar}$ и

$$q = \frac{m|A|}{\hbar^2}.$$

Задача 9.2.9. Рассмотрим одномерный кристалл из одинаковых атомов, расположенных на расстоянии a друг от друга (см. рис. 9.8). Будем считать, что спин каждого атома $s = 1/2$, а энергия взаимодействия атомов друг с другом описывается гамильтонианом Гейзенберга:

$$H = -\frac{2J}{\hbar^2} \sum_{n=1}^N \mathbf{s}_n \mathbf{s}_{n+1}, \quad \text{где } J > 0.$$

Считая векторы спина \mathbf{s}_n классическими, найти закон дисперсии спиновых волн $\omega(k)$ и эффективную массу магнона $m_{\text{эфф}}$.

Решение

Магнитный момент $\boldsymbol{\mu}_n$ n -го атома связан с его спином соотношением $\boldsymbol{\mu}_n = -2\mu_B \mathbf{s}_n / \hbar$, а его потенциальная энергия равна $U_n = -(\boldsymbol{\mu}_n \mathbf{B}_n)^*$, где \mathbf{B}_n – магнитная индукция поля, создаваемого магнитными моментами соседних атомов. С другой стороны, согласно модели Гейзенберга потенциальная энергия n -го атома равна

$$U_n = -\frac{2J}{\hbar^2} \mathbf{s}_n (\mathbf{s}_{n-1} + \mathbf{s}_{n+1}) = -\left(-\frac{2\mu_B \mathbf{s}_n}{\hbar} \right) \left(-\frac{J}{\hbar \mu_B} (\mathbf{s}_{n-1} + \mathbf{s}_{n+1}) \right),$$

откуда

$$\mathbf{B}_n = -\frac{J}{\hbar \mu_B} (\mathbf{s}_{n-1} + \mathbf{s}_{n+1}). \quad (9.59)$$

Используя (9.59), запишем момент сил, действующий на n -й атом в магнитном поле \mathbf{B}_n :

$$\mathbf{M}_n = [\boldsymbol{\mu}_n \times \mathbf{B}_n] = \frac{2J}{\hbar^2} ([\mathbf{s}_n \times \mathbf{s}_{n-1}] + [\mathbf{s}_n \times \mathbf{s}_{n+1}]).$$

Тогда уравнение вращательного движения для n -го атома будет иметь вид

$$\frac{d\mathbf{s}_n}{dt} = \mathbf{M}_n = \frac{2J}{\hbar^2} ([\mathbf{s}_n \times \mathbf{s}_{n-1}] + [\mathbf{s}_n \times \mathbf{s}_{n+1}]). \quad (9.60)$$

Аналогичные уравнения можно написать для каждого из атомов в цепочке[†]. В результате получим систему нелинейных уравнений (9.60). Чтобы её упростить, будем считать, что спины атомов могут отклоняться лишь на малые углы от некоторого равновесного направления z . Тогда

$$s_n^z \approx \frac{\hbar}{2} \quad \text{и} \quad s_n^x, s_n^y \ll s_n^z.$$

Пренебрегая в уравнении (9.60) слагаемыми второго порядка малости, получим для n -го атома систему линеаризованных уравнений:

$$\frac{ds_n^x}{dt} = -\frac{J}{\hbar} (s_{n-1}^y - 2s_n^y + s_{n+1}^y), \quad (9.61a)$$

* Здесь по повторяющемуся индексу n суммирование не предполагается.

† Поскольку мы считаем, что атомная цепочка свернута в кольцо, т.е. у неё нет граничных атомов, то все атомы эквивалентны.

$$\frac{ds_n^y}{dt} = \frac{J}{\hbar} (s_{n-1}^x - 2s_n^x + s_{n+1}^x), \quad (9.61б)$$

$$\frac{ds_n^z}{dt} = 0. \quad (9.61в)$$

Уравнение (9.61в) удовлетворяется автоматически, поскольку $s_n^z = \hbar/2$, а решение системы уравнений (9.61а) и (9.61б) будем искать в виде бегущих волн:

$$s_n^x = C_x e^{i(kan - \omega t)}, \quad s_n^y = C_y e^{i(kan - \omega t)}. \quad (9.62)$$

Подставляя (9.62) в систему уравнений (9.61а) и (9.61б), получим систему из двух линейных уравнений:

$$\begin{aligned} -i\omega C_x &= -\frac{JC_y}{\hbar} (e^{-ika} - 2 + e^{ika}) = \frac{2JC_y}{\hbar} (1 - \cos(ka)), \\ -i\omega C_y &= \frac{JC_x}{\hbar} (e^{-ika} - 2 + e^{ika}) = -\frac{2JC_x}{\hbar} (1 - \cos(ka)), \end{aligned}$$

которую удобно записать в виде:

$$\begin{pmatrix} i\omega & \frac{2J}{\hbar}(1 - \cos(ka)) \\ \frac{2J}{\hbar}(1 - \cos(ka)) & -i\omega \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_x \\ C_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (9.63)$$

Чтобы однородная система линейных уравнений (9.63) имела нетривиальное решение, необходимо, чтобы определитель матрицы в левой части уравнения был равен нулю. Раскрывая определитель, получим закон дисперсии спиновых волн:

$$\omega(k) = \frac{2J}{\hbar} [1 - \cos(ka)].$$

Бегущей спиновой волне мы можем поставить в соответствие квазичастицу *магنون*. Тогда закон дисперсии для магнона в одномерном кристалле будет иметь вид:

$$E(k) = 2J [1 - \cos(ka)]. \quad (9.64)$$

Выражение (9.64) с точностью до замены J на A совпадает с законом дисперсии для электрона (9.38), полученным в задаче

9.2.7. Поэтому эффективную массу магнона можно определить по аналогии с **задачей 9.2.7**:

$$m_{\text{эфф}} = \frac{\hbar^2}{2Ja^2}.$$

Замечание. Групповая скорость магнона вычисляется так же, как в **задаче 9.2.7**, и равна

$$v_{\text{гр}} = \frac{2Ja}{\hbar} |\sin(ka)|. \quad (9.65)$$

Зависимости (9.64) и (9.65) имеют такой же вид, как на рис. 9.9 и 9.10.

Ответ: $\omega(k) = \frac{2J}{\hbar} [1 - \cos(ka)], \quad m_{\text{эфф}} = \frac{\hbar^2}{2Ja^2}.$

Задача 9.2.10. Решить **задачу 9.2.9**, считая векторы спина \mathbf{s}_n квантовыми векторами $\hat{\mathbf{s}} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma}$.

Решение

Спиновую часть волновой функции $\chi(t)$ атомной цепочки запишем в виде тензорного произведения спиновых частей волновых функций отдельных атомов:

$$\chi(t) = \chi_1(t) \otimes \chi_2(t) \otimes \dots \otimes \chi_N(t), \quad (9.66)$$

где $\chi_n(t) = \begin{pmatrix} a_n^1(t) \\ a_n^2(t) \end{pmatrix}$ – столбцы, составленные из амплитуд

вероятности $a_n^1(t)$ и $a_n^2(t)$ обнаружения n -го атома в состояниях с проекцией спина $s_n^z = \hbar/2$ и $s_n^z = -\hbar/2$.

Гамильтониан Гейзенберга будет иметь вид:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= -\frac{2J}{\hbar^2} \sum_{n=1}^N \hat{\mathbf{s}}_n \hat{\mathbf{s}}_{n+1} = -\frac{J}{2} \sum_{n=1}^N \boldsymbol{\sigma}_n \boldsymbol{\sigma}_{n+1} = \\ &= -\frac{J}{2} \sum_{n=1}^N (\sigma_n^x \sigma_{n+1}^x + \sigma_n^y \sigma_{n+1}^y + \sigma_n^z \sigma_{n+1}^z). \end{aligned} \quad (9.67)$$

При этом входящие в него произведения матриц Паули надо понимать следующим образом. Например,

$$\sigma_n^x \sigma_{n+1}^x \equiv I_1 \otimes I_2 \otimes \dots \otimes \sigma_n^x \otimes \sigma_{n+1}^x \otimes \dots \otimes I_N,$$

где

$$I_n = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_n^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_n^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_n^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Таким образом, при действии оператора $\sigma_n^x \sigma_{n+1}^x$ на волновую функцию (9.66) получим:

$$\sigma_n^x \sigma_{n+1}^x \chi(t) = \chi_1(t) \otimes \chi_2(t) \otimes \dots \otimes \sigma_n^x \chi_n(t) \otimes \sigma_{n+1}^x \chi_{n+1}(t) \otimes \dots \otimes \chi_N(t),$$

т.е. матрица Паули с индексом n действует только на столбец $\chi_n(t)$.

Собственными функциями оператора \hat{s}_n^z , соответствующими собственным значениям $s_n^z = \hbar/2$ и $s_n^z = -\hbar/2$, являются столбцы*

$$\chi_n^+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad \chi_n^- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Используя свойства матриц Паули можно показать (см. **задачу 9.3.7**), что выполняется следующее операторное тождество:

$$\sigma_n \sigma_{n+1} = 2\hat{P}_{n,n+1} - 1, \quad (9.68)$$

где $\hat{P}_{n,n+1}$ – оператор перестановки спиновых частей волновых функций n -ого и $(n+1)$ -го атомов. На волновую функцию (9.66) оператор $\hat{P}_{n,n+1}$ действует следующим образом:

$$\hat{P}_{n,n+1} \chi(t) = \chi_1(t) \otimes \dots \otimes \chi_{n+1}(t) \otimes \chi_n(t) \otimes \dots \otimes \chi_N(t).$$

Используя тождество (9.68), гамильтониан Гейзенберга (9.67) можно записать в виде:

$$\hat{H} = -J \sum_{n=1}^N \left(\hat{P}_{n,n+1} - \frac{1}{2} \right). \quad (9.69)$$

Минимальное собственное значение гамильтониана (9.69) соответствует случаю, когда спины всех атомов направлены в одну сторону. Выберем ось z так, чтобы все спины были направлены вверх:

$$\chi_{\text{осн}} = \chi_1^+ \otimes \chi_2^+ \otimes \dots \otimes \chi_N^+. \quad (9.70)$$

* Далее мы для простоты будем говорить, что если n -й атом находится в состоянии с волновой функцией χ_n^+ (χ_n^-), то его спин направлен «вверх» («вниз»).

Действуя оператором (9.69) на волновую функцию (9.70), получим:

$$\hat{H}\chi_{\text{осн}} = -J \sum_{n=1}^N \left(\hat{P}_{n,n+1} - \frac{1}{2} \right) \chi_{\text{осн}} = -J \sum_{n=1}^N \left(\chi_{\text{осн}} - \frac{1}{2} \chi_{\text{осн}} \right) = -\frac{1}{2} JN \chi_{\text{осн}}.$$

Т.е. энергия основного состояния атомной цепочки равна

$$E_{\text{осн}} = -\frac{1}{2} JN.$$

Удобнее отсчитывать энергию основного состояния от нуля. Поэтому вычтем из гамильтониана величину $-JN/2$. Тогда гамильтониан Гейзенберга будет иметь вид:

$$\hat{H} = -J \sum_{n=1}^N \left(\hat{P}_{n,n+1} - 1 \right). \quad (9.71)$$

Возбужденные состояния с минимальной энергией будут описываться волновыми функциями вида

$$\chi^{(n)} = \chi_1^+ \otimes \chi_2^+ \otimes \dots \otimes \chi_n^- \otimes \dots \otimes \chi_N^+. \quad (9.72)$$

Это состояния, в которых спин одного из атомов направлен вниз. Волновые функции $\chi^{(n)}$ ортонормированы и ортогональны волновой функции (9.70) основного состояния:

$$\left(\chi^{(n)} \right)^+ \chi^{(m)} = \delta_{nm}, \quad \left(\chi^{(n)} \right)^+ \chi_{\text{осн}} = 0.$$

Действуя на волновую функцию (9.72) оператором (9.71), получим:

$$\hat{H}\chi^{(n)} = -J \sum_{n=1}^N \left(\hat{P}_{n,n+1} - 1 \right) \chi^{(n)} = -J \left(\chi^{(n+1)} + \chi^{(n-1)} - 2\chi^{(n)} \right).$$

Поэтому матричные элементы гамильтониана Гейзенберга равны

$$H_{nm} = \left(\chi^{(n)} \right)^+ \hat{H}\chi^{(m)} = \begin{cases} 2J, & \text{при } m = n, \\ -J, & \text{при } m = n \pm 1; \end{cases} \quad (9.73)$$

в остальных случаях $H_{nm} = 0$. Обозначим амплитуду вероятности обнаружения атомной цепочки в возбужденном состоянии $\chi^{(n)}$, как $b_n(t)$. Амплитуды вероятности $b_n(t)$ должны удовлетворять уравнению Шредингера в матричной форме:

$$i\hbar \frac{\partial b_n}{\partial t} = \sum_m H_{nm} b_m,$$

которое после подстановки матричных элементов (9.73) приобретает вид

$$i\hbar \frac{\partial b_n}{\partial t} = -Jb_{n-1} + 2Jb_n - Jb_{n+1}. \quad (9.74)$$

С точностью до переобозначений уравнение (9.74) совпадает с уравнением (9.35), решенным в задаче 9.2.7. Решение уравнения (9.74) ищем в виде бегущей волны:

$$b_n(t) = Ce^{i(kan - \omega t)}, \quad (9.75)$$

и после подстановки (9.75) в уравнение (9.74) получаем закон дисперсии для спиновых волн:

$$\omega(k) = \frac{2J}{\hbar} [1 - \cos(ka)]. \quad (9.76)$$

Следовательно, для закона дисперсии, групповой скорости и эффективной массы магнона получим (см. задачи 9.2.7 и 9.2.9):

$$E(k) = 2J[1 - \cos(ka)], \quad v_{\text{гр}} = \frac{2Ja}{\hbar} |\sin(ka)|, \quad m_{\text{эфф}} = \frac{\hbar^2}{2Ja^2}.$$

Замечания.

1. Мы приходим к одному и тому же закону дисперсии (9.76) спиновых волн, рассматривая спины атомов и как квантовые, и как классические (задача 9.2.9) векторы. Это важное обстоятельство позволяет существенно упростить решение ряда более сложных задач теории магнетизма, рассматривая магнитные моменты атомов как классические векторы.

2. Сравнивая результаты задач 9.2.7 и 9.2.9 (или 9.2.10) мы видим, что магноны в атомной цепочке ведут себя подобно электронам, т.е. в приближении длинных волн имеют квадратичный закон дисперсии и, как следствие, ненулевую эффективную массу. Напомним, что для фононов мы получали в длинноволновом приближении линейный закон дисперсии (см. задачу 9.2.1), что соответствует нулевой эффективной массе.

Ответ: $\omega(k) = \frac{2J}{\hbar} [1 - \cos(ka)], \quad m_{\text{эфф}} = \frac{\hbar^2}{2Ja^2}.$

Задача 9.2.1. Рассмотрим ферромагнитный кристалл с простой кубической решеткой (постоянная решетки a). Будем считать, что спин каждого атома $s = 1/2$ и энергия взаимодействия атомов друг с другом описывается гамильтонианом Гейзенберга с $J > 0$. Тогда

в длинноволновом приближении $ka \ll 1$ закон дисперсии магнонов имеет вид*:

$$\omega \approx \frac{Ja^2}{\hbar} k^2. \quad (9.77)$$

Найти относительное уменьшение намагниченности кристалла $|\Delta M|/M_0$ при низких температурах $k_B T \ll \hbar\omega_{\max}$, где $\hbar\omega_{\max}$ – максимально возможная энергия магнона в кристалле, а M_0 – намагниченность кристалла при $T = 0$ К.

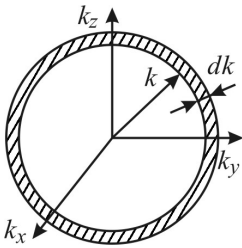


Рис. 9.12. Сферический слой в пространстве волновых векторов.

Решение

Считая закон дисперсии магнонов квадратичным при $ka \ll 1$, найдем плотность состояний магнонов. Из закона дисперсии (9.77) магнонов следует, что

$$d\omega = \frac{2Ja^2}{\hbar} k dk \quad \text{и} \quad \sqrt{\omega} = \sqrt{\frac{Ja^2}{\hbar}} k. \quad (9.78)$$

Используя (9.78), найдем число квантовых состояний магнонов† с волновым числом в интервале $(k, k + dk)$ (см. рис. 9.12):

$$dn_s = \frac{V_{\text{сф. слой}}}{V_{\text{кв. сост.}}} = \frac{4\pi k^2 dk}{(2\pi)^3} V = \frac{\sqrt{\omega} d\omega}{4\pi^2} \left(\frac{\hbar}{Ja^2}\right)^{3/2} V$$

где V – объем кристалла.

Согласно формуле (8.24), плотность вероятности обнаружить магнон с частотой в интервале $(\omega, \omega + d\omega)$ равна

$$f(\omega) = \frac{1}{N_M} \frac{dn_s}{d\omega} \bar{n} = \frac{\sqrt{\omega}}{4\pi^2} \left(\frac{\hbar}{Ja^2}\right)^{3/2} \frac{1}{n_M} \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) - 1}, \quad (9.79)$$

где \bar{n} – среднее число магнонов в одном квантовом состоянии, определяемое распределением Бозе–Эйнштейна, а n_M – концентрация магнонов в кристалле.

* Этот результат является обобщением формулы (9.76) на трехмерный случай.

† В отличие от фононов магноны имеют только одну поляризацию.

При $T = 0$ К спины всех атомов направлены в одну сторону, т.е. их проекции на некоторую ось z равны $\hbar/2$, при этом проекции магнитных моментов атомов на ту же ось равны $-\mu_B$. Таким образом, намагниченность кристалла при $T = 0$ К равна $M_0 = \mu_B n$, где n – концентрация магнитных атомов. Как следует из задачи 9.2.10, магنون описывает состояние кристалла, в котором проекция спина одного из атомов на ось z равна $-\hbar/2$, а проекция магнитного момента на ту же ось равна μ_B . Таким образом, один магنون уменьшает магнитный момент кристалла на величину $2\mu_B$. Т.е. при отличной от нуля температуре намагниченность кристалла уменьшается на величину $|\Delta M| = 2\mu_B n_{\text{маг}}$. Концентрацию магненов в кристалле найдем из условия нормировки плотности вероятности (9.79):

$$\int_0^{\omega_{\max}} f(\omega) d\omega = \frac{1}{4\pi^2 n_M} \left(\frac{\hbar}{Ja^2} \right)^{3/2} \int_0^{\omega_{\max}} \frac{\sqrt{\omega} d\omega}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) - 1} = 1,$$

откуда

$$\frac{|\Delta M|}{M_0} = 2 \frac{n_{\text{маг}}}{n} = \frac{1}{2\pi^2 n} \left(\frac{\hbar}{Ja^2} \right)^{3/2} \int_0^{\omega_{\max}} \frac{\sqrt{\omega} d\omega}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) - 1}. \quad (9.80)$$

Учтем, что для кристалла с простой кубической решеткой $na^3 = 1$, а входящий в (9.80) интеграл при низкой температуре ($k_B T \ll \hbar\omega_{\max}$) может быть вычислен точно:

$$\int_0^{\omega_{\max}} \frac{\sqrt{\omega} d\omega}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) - 1} \approx \left(\frac{k_B T}{\hbar} \right)^{3/2} \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{x} dx}{e^x - 1} = \left(\frac{k_B T}{\hbar} \right)^{3/2} \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) \zeta\left(\frac{3}{2}\right),$$

где $\Gamma(3/2) = \sqrt{\pi}/2$ и $\zeta(3/2) = 2,612$. В результате, относительное уменьшение намагниченности кристалла $|\Delta M|/M_0$ при низких температурах равно

$$\frac{|\Delta M|}{M_0} = 0,118 \left(\frac{k_B T}{J} \right)^{3/2}. \quad (9.81)$$

Выражение (9.81) является частным случаем закона $T^{3/2}$ Блоха.

Ответ:
$$\frac{|\Delta M|}{M_0} = 0,118 \left(\frac{k_B T}{J} \right)^{3/2}.$$

Задача 9.2.12. Для ферромагнитного кристалла с простой кубической решеткой, рассмотренного в задаче 9.2.11, найти вклад магнонов в теплоемкость C_V при низкой температуре $k_B T \ll \hbar \omega_{\max}$.

Решение

Используя выражение (9.79), вычислим среднюю энергию магнонов, приходящуюся на один атом кристалла (сравни с (9.27)):

$$\bar{E} = \frac{n_M}{n} \int_0^{\omega_{\max}} \hbar \omega f(\omega) d\omega = \frac{\hbar}{4\pi^2} \left(\frac{\hbar}{J a^2} \right)^{3/2} \frac{1}{n} \int_0^{\omega_{\max}} \frac{\omega^{3/2}}{\exp\left(\frac{\hbar \omega}{k_B T}\right) - 1} d\omega. \quad (9.82)$$

Для кристалла с простой кубической решеткой $na^3 = 1$. При низкой температуре ($k_B T \ll \hbar \omega_{\max}$) интеграл, входящий в (9.82), может быть вычислен точно:

$$\int_0^{\omega_{\max}} \frac{\omega^{3/2} d\omega}{\exp\left(\frac{\hbar \omega}{k_B T}\right) - 1} \approx \left(\frac{k_B T}{\hbar} \right)^{5/2} \int_0^{\infty} \frac{x^{3/2} dx}{e^x - 1} = \left(\frac{k_B T}{\hbar} \right)^{5/2} \Gamma\left(\frac{5}{2}\right) \zeta\left(\frac{5}{2}\right),$$

где $\Gamma(5/2) = 3\sqrt{\pi}/4$ и $\zeta(5/2) = 1,341$. В результате средняя энергия магнонов в расчете на один атом кристалла равна

$$\bar{E} = 0,045 k_B \left(\frac{k_B}{J} \right)^{3/2} T^{5/2}. \quad (9.83)$$

Умножая выражение (9.83) на число Авогадро и дифференцируя по температуре, получим вклад магнонов в теплоемкость ферромагнитного кристалла:

$$C_V = N_A \frac{d\bar{E}}{dT} = \frac{5}{2} N_A \frac{\bar{E}}{T} = 0,113R \left(\frac{k_B T}{J} \right)^{3/2}. \quad (9.84)$$

Замечание. Соотношения (9.81) и (9.84), полученные в задачах 9.2.11 и 9.2.12, как правило, выполняются с хорошей точностью при температурах ниже одной четвертой от температуры Кюри ферромагнитного кристалла.

Ответ: $C_V = 0,113R \left(\frac{k_B T}{J} \right)^{3/2}.$

9.3. Короткие задачи

Задача 9.3.1. Для одномерной цепочки, рассмотренной в задаче 9.2.1, найдите число dn_ω продольных мод колебаний в диапазоне частот $(\omega, \omega + d\omega)$. Выразите ответ через число N шариков в цепочке и максимальную частоту колебаний ω_{\max} .

Решение

В задаче 9.2.1 был установлен закон дисперсии акустических волн:

$$\omega(k) = 2\sqrt{\frac{\beta}{m}} \sin\left(\frac{ka}{2}\right), \quad \text{при } k \in \left[0, \frac{\pi}{a}\right]. \quad (9.85)$$

Дифференцируя (9.85), получим:

$$\begin{aligned} d\omega &= a\sqrt{\frac{\beta}{m}} \cos\left(\frac{ka}{2}\right) dk = \frac{a}{2} \sqrt{4\frac{\beta}{m} - 4\frac{\beta}{m} \sin^2\left(\frac{ka}{2}\right)} dk = \\ &= \frac{a}{2} \sqrt{\omega_{\max}^2 - \omega^2} dk, \end{aligned} \quad (9.86)$$

где $\omega_{\max} = 2\sqrt{\beta/m}$. Используя (9.86), найдем число dn_ω продольных мод колебаний в диапазоне частот $(\omega, \omega + d\omega)$:

$$dn_\omega = 2 \frac{dk}{2\pi/L} = \frac{2N}{\pi\sqrt{\omega_{\max}^2 - \omega^2}} d\omega,$$

где $2\pi/L$ – объем одной моды колебаний в пространстве волновых векторов, $L = Na$. Множитель 2 обусловлен тем, что в первой зоне Бриллюэна каждому значению частоты ω соответствуют два значения волнового числа k .

Ответ: $dn_{\omega} = \frac{2N}{\pi\sqrt{\omega_{\max}^2 - \omega^2}} d\omega.$

Задача 9.3.2. Для одномерной цепочки, рассмотренной в задаче 9.2.1, найдите температуру Дебая, исходя из её определения.

Решение

Согласно задаче 9.2.1, закон дисперсии бегущих волн имеет вид:

$$\omega(k) = 2\sqrt{\frac{\beta}{m}} \left| \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \right|,$$

а максимальная частота колебаний равна $\omega_{\max} = 2\sqrt{\beta/m}$. Следовательно, температура Дебая цепочки равна

$$T_D = \frac{\hbar\omega_{\max}}{k_B} = \frac{2\hbar}{k_B} \sqrt{\frac{\beta}{m}}. \quad (9.87)$$

Ответ: $T_D = \frac{2\hbar}{k_B} \sqrt{\frac{\beta}{m}}.$

Задача 9.3.3. Оценить температуру Дебая T_D одномерного кристалла, считая закон дисперсии фононов в кристалле линейным. Известна скорость звука $c_{зв}$ в кристалле и линейная концентрация атомов n . Для случая одномерного кристалла, рассмотренного в задаче 9.2.1, сравнить полученную оценку температуры Дебая с её точным значением.

Решение

Считая, что закон дисперсии фононов остается линейным при любых значениях волнового числа, получим:

$$\omega_{\max} = c_{зв} k_{\max} = c_{зв} \frac{\pi}{a} = c_{зв} \pi n,$$

где $k_{\max} = \pi/a$ – граница первой зоны Бриллюэна, $n = 1/a$ – линейная концентрация атомов. Тогда температура Дебая цепочки равна

$$T_D = \frac{\hbar\omega_{\max}}{k_B} = \frac{\hbar}{k_B} c_{зв} \pi n.$$

Для цепочки из шариков, рассмотренной в задаче 9.2.1, $c_{зв} = a\sqrt{\beta/m}$, $n = 1/a$. Поэтому

$$T_D = \frac{\hbar\omega_{\max}}{k_B} = \frac{\pi\hbar}{k_B} \sqrt{\frac{\beta}{m}}. \quad (9.88)$$

Сравнивая оценку температуры Дебая (9.88) с её точным значением (9.87), получаем:

$$\frac{T_D}{T_D^{\text{точн}}} = \frac{\pi}{2},$$

Таким образом, оценка (9.88) температуры Дебая, основанная на линейном законе дисперсии, дает значение, завышенное в $\pi/2 \approx 1,57$ раза.

Ответ: $T_D = \frac{\hbar}{k_B} c_{зв} \pi n$, $\frac{T_D}{T_D^{\text{точн}}} = \frac{\pi}{2}$.

Задача 9.3.4. Считая, что на каждую моду колебаний кристалла приходится средняя энергия, равная $k_B T$, найти классическую молярную теплоемкость C_V кристалла.

Решение

В кристалле, состоящем из N_A атомов, существует $(3N_A - 6) \approx 3N_A$ различных мод колебаний. Согласно классической теореме о равнораспределении энергии по степеням свободы, на каждую моду колебаний приходится средняя энергия, равная $k_B T$. Поэтому энергия кристалла равна

$$E = 3N_A kT = 3RT, \quad (9.89)$$

где R – универсальная газовая постоянная. Дифференцируя выражение (9.89) по температуре, найдем молярную теплоемкость кристалла:

$$C_V = \frac{dE}{dT} = 3R.$$

Это закон Дюлонга и Пти. Он справедлив только при достаточно высокой температуре $T \gg T_D$.

Ответ: $C_V = 3R$.

Задача 9.3.5. Закон дисперсии электрона в одномерном кристалле имеет вид (см. задачу 9.2.7):

$$E(p) = 2A \left[1 - \cos \left(\frac{pa}{\hbar} \right) \right].$$

Считая, что на один атом одномерного кристалла приходится в среднем один электрон проводимости, найти скорость Ферми электронов проводимости.

Решение

Согласно формуле (9.39), групповая скорость электрона в одномерном кристалле равна

$$v_{\text{гр}} = \frac{2Aa}{\hbar} \left| \sin(ka) \right| = \frac{2Aa}{\hbar} \left| \sin \left(\frac{pa}{\hbar} \right) \right|.$$

Импульс Ферми одномерного электронного газа равен (см. задачу 8.4.5)

$$p_{\text{F}} = \hbar \frac{\pi n}{2}.$$

Если на один атом одномерного кристалла приходится в среднем один электрон проводимости, то концентрация электронов проводимости равна $n = 1/a$. Тогда для скорости Ферми электронов проводимости получим:

$$v_{\text{F}} = v_{\text{гр}} \Big|_{p=p_{\text{F}}} = \frac{2Aa}{\hbar} \left| \sin \left(\frac{p_{\text{F}}a}{\hbar} \right) \right| = \frac{2Aa}{\hbar} \left| \sin \left(\frac{\pi}{2} \right) \right| = \frac{2Aa}{\hbar}.$$

Ответ: $v_{\text{F}} = \frac{2Aa}{\hbar}.$

Задача 9.3.6. Оценить максимальную скорость электронов проводимости меди при $T = 0$ К. Постоянная решетки меди равна $a = 3.615 \cdot 10^{-10}$ м. Атомы меди имеют по одному валентному электрону, а кристалл меди имеет кубическую гранецентрированную решетку. Закон дисперсии электрона в кристалле меди считать квадратичным по импульсу, а эффективную массу электрона – равной массе свободного электрона.

Решение

Если закон дисперсии электрона в кристалле меди считать квадратичным по импульсу:

$$E = \frac{p^2}{2m_{\text{эфф}}} = \frac{\hbar^2}{2m_{\text{эфф}}} k^2,$$

то максимальная скорость электронов проводимости меди при $T = 0$ К, равна

$$v_{\text{max}} = v_{\text{гр}} \Big|_{p=p_{\text{F}}} = \frac{1}{\hbar} \left| \frac{dE}{dk} \right| = \frac{p_{\text{F}}}{m_{\text{эфф}}},$$

где p_{F} – импульс Ферми однородного электронного газа (см. задачу 8.2.5):

$$p_{\text{F}} = \hbar (3\pi^2 n)^{1/3}.$$

Атомы меди имеют по одному валентному электрону, поэтому концентрация электронов проводимости n равна концентрации атомов меди. Концентрация атомов в кубическом гранецентрированном кристалле равна $n = 4/a^3$. Считая, что эффективная масса электрона в кристалле меди равна массе свободного электрона, получим:

$$v_{\text{max}} = (12\pi^2)^{1/3} \frac{\hbar}{m_e a} = \frac{4,91 \cdot 1,05 \cdot 10^{-34}}{0,9 \cdot 10^{-30} \cdot 3,615 \cdot 10^{-10}} = 1,58 \cdot 10^6 \text{ м/с}.$$

Ответ: $v_{\text{max}} = (12\pi^2)^{1/3} \frac{\hbar}{m_e a} = 1,58 \cdot 10^6 \text{ м/с}.$

Задача 9.3.7. Рассмотрим систему из двух частиц со спином $s = 1/2$. Используя свойства матриц Паули, показать, что выполняется следующее операторное тождество:

$$\sigma_1 \sigma_2 = 2\hat{P}_{1,2} - 1, \quad (9.90)$$

где $\hat{P}_{1,2}$ – оператор перестановки спиновых частей волновых функций частиц.

Решение

Спиновая часть волновой функции двух частиц представляет собой тензорное произведение спиновых частей волновых функций этих частиц: $\chi(t) = \chi_1(t) \otimes \chi_2(t)$, где $\chi_i(t) = a_i^+(t)\chi^+ + a_i^-(t)\chi^-$. Поэтому чтобы доказать операторное равенство (9.90), достаточно

показать, что операторы $\sigma_1\sigma_2$ и $2\hat{P}_{1,2} - 1$ одинаково действуют на волновые функции $\chi^+ \otimes \chi^+$, $\chi^+ \otimes \chi^-$, $\chi^- \otimes \chi^+$ и $\chi^- \otimes \chi^-$.

Вспомним, как матрицы Паули действуют на столбцы χ^\pm :

$$\begin{aligned}\sigma_x\chi^+ &= \chi^-, & \sigma_y\chi^+ &= i\chi^-, & \sigma_z\chi^+ &= \chi^+, \\ \sigma_x\chi^- &= \chi^+, & \sigma_y\chi^- &= -i\chi^+, & \sigma_z\chi^- &= -\chi^-.\end{aligned}$$

Тогда оператор $\sigma_1\sigma_2 = \sigma_1^x\sigma_2^x + \sigma_1^y\sigma_2^y + \sigma_1^z\sigma_2^z$ действует на волновые функции $\chi^+ \otimes \chi^+$, $\chi^+ \otimes \chi^-$, $\chi^- \otimes \chi^+$ и $\chi^- \otimes \chi^-$ следующим образом:

$$\begin{aligned}\sigma_1\sigma_2\chi^+ \otimes \chi^+ &= \chi^- \otimes \chi^- - \chi^- \otimes \chi^- + \chi^+ \otimes \chi^+ = (2\hat{P}_{1,2} - 1)\chi^+ \otimes \chi^+, \\ \sigma_1\sigma_2\chi^+ \otimes \chi^- &= \chi^- \otimes \chi^+ + \chi^- \otimes \chi^+ - \chi^+ \otimes \chi^- = (2\hat{P}_{1,2} - 1)\chi^+ \otimes \chi^-, \\ \sigma_1\sigma_2\chi^- \otimes \chi^+ &= \chi^+ \otimes \chi^- + \chi^+ \otimes \chi^- - \chi^- \otimes \chi^+ = (2\hat{P}_{1,2} - 1)\chi^- \otimes \chi^+, \\ \sigma_1\sigma_2\chi^- \otimes \chi^- &= \chi^+ \otimes \chi^+ - \chi^+ \otimes \chi^+ + \chi^- \otimes \chi^- = (2\hat{P}_{1,2} - 1)\chi^- \otimes \chi^-,\end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}\hat{P}_{1,2}\chi^+ \otimes \chi^+ &= \chi^+ \otimes \chi^+, & \hat{P}_{1,2}\chi^+ \otimes \chi^- &= \chi^- \otimes \chi^+, \\ \hat{P}_{1,2}\chi^- \otimes \chi^+ &= \chi^- \otimes \chi^+, & \hat{P}_{1,2}\chi^- \otimes \chi^- &= \chi^- \otimes \chi^-.\end{aligned}$$

Таким образом, операторное тождество (9.90) доказано.

Задача 9.3.8. Известно, что намагниченность M ферромагнитного кристалла с простой кубической решеткой при некоторой температуре составляет 99% от намагниченности M_0 при $T = 0$ К. Оценить вклад магнов в молярную теплоемкость кристалла C_V .

Решение

Согласно формулам (9.81) и (9.84), при достаточно низкой температуре относительное уменьшение намагниченности кристалла и вклад магнов в теплоемкость одинаково зависят от температуры:

$$\frac{M_0 - M}{M_0} = 0,118 \left(\frac{k_B T}{J} \right)^{3/2} \quad \text{и} \quad C_V = 0,113 R \left(\frac{k_B T}{J} \right)^{3/2}.$$

Поэтому можно выразить вклад магнов в теплоемкость через уменьшение намагниченности:

$$C_V = 0,96R \frac{M_0 - M}{M_0}. \quad (9.91)$$

Заметим, что в соотношение (9.91) не входят ни температура T , ни обменный интеграл J . Согласно условию задачи, $M = 0,99M_0$, поэтому вклад магновнов в молярную теплоемкость кристалла $C_V = 0,0096R$.

Ответ: $C_V = 0,0096R$.

9.4. Задачи для самостоятельного решения

Задача 9.4.1. Для цепочки из шариков двух сортов, рассмотренной в задаче 9.2.2, найти групповую скорость бегущих волн.

Ответ:
$$v_{\text{гп}}^{\pm} = \frac{\beta a}{\omega_{\pm}} \frac{|\sin(2ka)|}{\sqrt{(m_1 + m_2)^2 - 4m_1 m_2 \sin^2(ka)}}, \quad \text{где}$$

$$\omega_{\pm}^2 = \beta \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) \pm \beta \sqrt{\left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right)^2 - \frac{4 \sin^2(ka)}{m_1 m_2}}.$$

Задача 9.4.2. Оценить температуру Дебая T_D двумерного кристалла, считая закон дисперсии фононов в кристалле линейным. Известна скорость звука $c_{\text{зв}}$ в кристалле и поверхностная концентрация атомов n .

Ответ:
$$T_D = \frac{2\hbar}{k_B} c_{\text{зв}} \sqrt{\pi n}.$$

Задача 9.4.3 (6.186 [1]). Вычислить дебаевскую температуру для железа, у которого скорости распространения продольных и поперечных колебаний равны соответственно 5.85 и 3.23 км/с.

Ответ:
$$T_D = \frac{\hbar}{k_B} 3 \sqrt{\frac{18\pi^2 n}{c_{\parallel}^{-3} + 2c_{\perp}^{-3}}} = 470 \text{ К}.$$

Задача 9.4.4 (6.187 [1]). Оценить скорость распространения акустических колебаний в алюминии, дебаевская температура которого $T_D = 396 \text{ К}$.

Ответ: $c_{зв} \approx \frac{k_B T_D}{\hbar} (6\pi^2 n)^{-1/3} = 3,4 \text{ км/с}.$

Задача 9.4.5 (6.196 [1]). Оценить максимальное значение энергии и импульса фонона в меди, дебаевская температура которой $T_D = 330 \text{ К}.$

Ответ: $\varepsilon_{\max} = 0,028 \text{ эВ}, p_{\max} \sim 10^{-24} \text{ кг} \cdot \text{м/с}.$

Задача 9.4.6. Вычислить энергию нулевых колебаний в расчете на один моль атомов одномерного кристалла, температура Дебая T_D которого известна.

Ответ: $E = \frac{1}{4} RT_D.$

Задача 9.4.7. Вычислить энергию нулевых колебаний в расчете на один моль атомов двумерного кристалла, температура Дебая T_D которого известна.

Ответ: $E = \frac{2}{3} RT_D.$

Задача 9.4.8 (6.190 [1]). Вычислить энергию нулевых колебаний одного грамма меди, дебаевская температура которой $T_D = 330 \text{ К}.$

Ответ: $E = \frac{9RT_D}{8\mu} = 48,6 \text{ Дж/г}, \mu - \text{молярная масса меди}.$

Задача 9.4.9. Считая, что фононы имеют линейный закон дисперсии $\omega = c_{зв} k$ при любых значениях волнового числа, найти теплоемкость C_V кристалла. Температура Дебая T_D кристалла известна.

Ответ: $C_V = 36R \left(\frac{T}{T_D} \right)^3 \int_0^{T_D/T} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} - 9R \left(\frac{T_D}{T} \right) \frac{1}{e^{T_D/T} - 1}.$

Замечание. Полученная зависимость теплоемкости от температуры называется *интерполяционной формулой Дебая*.

Задача 9.4.10. Исходя из интерполяционной формулы Дебая, полученной в задаче 9.4.9, получить выражения для теплоемкости кристалла в двух предельных случаях: а) $T \ll T_D$, б) $T \gg T_D$.

Ответ: а) $C_V = \frac{12}{5} \pi^4 R \left(\frac{T}{T_D} \right)^3$, б) $C_V = 3R$.

Задача 9.4.11 (6.188 [1]). Получить выражение, определяющее зависимость теплоемкости одномерного кристалла от температуры, если дебаевская температура кристалла равна T_D . Упростить полученное выражение для случая $T \gg T_D$.

Ответ: $C_V = 2R \left(\frac{T}{T_D} \right)^{T_D/T} \int_0^{T_D/T} \frac{x dx}{e^x - 1} - R \left(\frac{T_D}{T} \right) \frac{1}{e^{T_D/T} - 1}$,
 $C_V = R$ при $T \gg T_D$.

Задача 9.4.12 (9.6 [2]). Определить скорость электронов в двумерном металле с квадратной решеткой, если закон дисперсии электронов имеет вид: $E(p) = (p_x^2 + p_y^2) / 2m$. Площадь элементарной ячейки в плоскости решетки равна $S = 0,85a^2$, где $a = 3 \cdot 10^{-10}$ м. Считать, что на элементарную ячейку приходится один валентный электрон, а масса электрона в зоне проводимости равна массе свободного электрона.

Ответ: $v_F = \frac{\hbar}{m} \sqrt{\frac{2\pi}{S}} \approx 10^6$ м/с.

Задача 9.4.13 (9.8 [2]). Закон дисперсии электрона в одномерном металле: $E(k) = 2A[1 - \cos(ka)]$ (см. задачу 9.2.7). Металл находится в постоянном однородном электрическом поле с напряженностью $\mathbf{E} = \epsilon \mathbf{e}_x$, направленной вдоль оси металла. Найти закон движения электрона, импульс которого в момент времени t_0 равен нулю. Процессы рассеяния электронов не учитывать.

Ответ: $x(t) = x_0 + \frac{2A}{q_e \epsilon} \left[1 - \cos \left(\frac{q_e \epsilon a (t - t_0)}{\hbar} \right) \right]$.

Задача 9.4.14 (11.1 [3]). Рассмотрим бесконечную цепочку одинаковых атомов. Расстояние между соседними атомами равно

a . Предположим, что электрон может находиться в каждом из атомов в двух состояниях с различными энергиями E_I и E_{II} . Предположим, что электрон может перескакивать со своего атома на ближайший соседний атом с частотой $A/\hbar > 0$, если энергия электрона при этом не изменяется, или с частотой $B/\hbar > 0$, если энергия электрона изменяется. Найдите закон дисперсии электрона в такой цепочке.

Ответ:

$$E_{1,2} = \frac{1}{2} \left[E_I + E_{II} \pm \sqrt{(E_I - E_{II})^2 + 16B^2 \cos^2(ka)} \right] - 2A \cos(ka).$$

Задача 9.4.15 (11.1 [3]). В задаче 9.4.14 рассмотреть предельные случаи: а) $|E_I - E_{II}| \gg 4B$, б) $|E_I - E_{II}| \ll 4B$.

Ответ: а) $E_1 = E_I - 2A \cos(ka)$, $E_2 = E_{II} - 2A \cos(ka)$;

$$\text{б) } E_{1,2} = \frac{E_I + E_{II}}{2} - 2(A \pm B) \cos(ka).$$

Задача 9.4.16 (11.2 [3]). Рассмотрим бесконечную цепочку из атомов двух сортов: четные атомы – сорт a , нечетные – сорт b . Энергия электрона в атоме сорта a равна $E_0 + \Delta E$, а в атоме сорта b равна $E_0 - \Delta E$. Матричный элемент гамильтониана для перехода между ближайшими соседями равен $-A$, расстояние между атомами равно L . Найти закон дисперсии электронов.

Ответ: $E = E_0 \pm \sqrt{(\Delta E)^2 + (2A \cos(kL))^2}$.

Задача 9.4.17 (7.19 [4]). Рассмотреть движение электрона в одномерной бесконечной кристаллической решетке, считая потенциальную энергию $U(x)$ равной нулю при $2na < x < (2n+1)a$ и U_0 при $(2n+1)a < x < (2n+2)a$, где $a > 0$ и n – целое число. Найти закон дисперсии электрона. Рассмотреть случай $0 < E < U_0$.

Ответ: $\cos(2ka) = \cos(k_1 a) \operatorname{ch}(qa) - \frac{k_1^2 - q^2}{2k_1 q} \sin(k_1 a) \operatorname{sh}(qa)$,

$$\text{где } k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad q = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}.$$

Задача 9.4.18 (7.19 [4]). Решить задачу 9.4.17 для случая $E > U_0$.

Ответ: $\cos(2ka) = \cos(k_1a)\cos(k_2a) - \frac{k_1^2 + k_2^2}{2k_1k_2} \sin(k_1a)\sin(k_2a)$,

где $k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$, $k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar}$.

Задача 9.4.19. Рассмотрим одномерный антиферромагнитный кристалл из одинаковых атомов, расположенных на расстоянии a друг от друга. Будем считать, что спин каждого атома $s = 1/2$ и энергия взаимодействия атомов друг с другом описывается гамильтонианом Гейзенберга:

$$H = -\frac{2J}{\hbar^2} \sum_{n=1}^N \mathbf{s}_n \mathbf{s}_{n+1}, \text{ где } J < 0.$$

Найти закон дисперсии спиновых волн $\omega(k)$ и эффективную массу магнона $m_{\text{эфф}}$.

Ответ: $\omega(k) = \frac{2|J|}{\hbar} |\sin(ka)|$, $m_{\text{эфф}} = 0$.

Список литературы

1. *Иродов И.Е.* Задачи по общей физике. – М.: Наука, 1979. – 369 с.
2. *Миронова Г.А., Брандт Н.Н., Салецкий А.М., Поляков О.П., Трубочев О.О.* Введение в квантовую физику в вопросах и задачах. – М.: Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, 2012. – 320 с.
3. *Фейнман Р., Лейтон Р., Сэндс М.* Фейнмановские лекции по физике: Задача и упражнения с ответами и решениями к вып. 5-9. – М.: УРСС: Книжный дом «ЛИБРОКОМ», 2012. – 272 с.
4. Сборник задач по атомной физике. Под ред. С.С. Красильникова, А.М. Попова, О.В. Тихоновой. – М.: Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, 2010. – 217 с.

ГЛАВА 10 ЭЛЕКТРОНЫ И ДЫРКИ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ

10.1. Теоретический материал

1. Электроны и дырки в полупроводнике. Рассмотрим закон дисперсии электрона в некотором кристалле (рис. 10.1а). Из рисунка видно, что ни при каком значении k_x энергия электрона не принимает значений, лежащих в интервале $(0, E_g)$. Этот интервал энергий называется *запрещенной зоной*, а E_g – *шириной запрещенной зоны*. Полупроводники и диэлектрики принципиально отличаются от металлов тем, что химический потенциал μ_e их

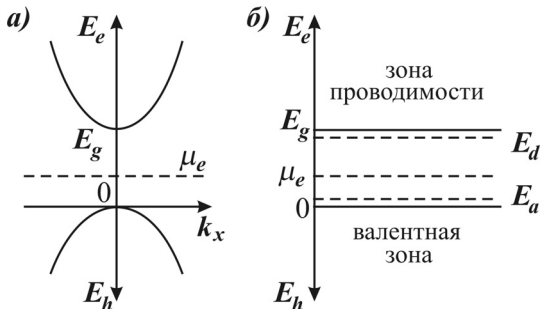


Рис. 10.1. а) Схематичное изображение закона дисперсии электронов в полупроводниковом кристалле; б) энергетическая диаграмма, на которой отмечены потолок валентной зоны ($E_e = 0$), дно зоны проводимости ($E_e = E_g$), химический потенциал μ_e электронов, донорный E_d и акцепторный E_a уровни.

электронов находится в запрещенной зоне. Поэтому при температуре, близкой к абсолютному нулю, все квантовые состояния в энергетической зоне, лежащей ниже запрещенной, заняты электронами. Эта энергетическая зона называется *валентной зоной*. В свою очередь все квантовые состояния в энергетической зоне, лежащей выше запрещенной, оказываются свободными. Эта энергетическая зона называется *зоной проводимости*. Полупроводники от диэлектриков отличаются лишь шириной запрещенной зоны. У полупроводников $E_g \sim 1$ эВ, у диэлектриков $E_g \sim 5$ эВ.

Минимальное значение энергии электрона в зоне проводимости (*дно зоны проводимости*) не обязательно достигается при том же значении волнового вектора \mathbf{k} , что и максимальное значение энергии электрона в валентной зоне (*потолок валентной зоны*). Поэтому вместо закона дисперсии (рис. 10.1*a*) часто рисуют энергетическую диаграмму (рис. 10.1*b*), на которой отмечают только характерные для кристалла энергии. Далее мы будем отсчитывать энергию электрона E_e от потолка валентной зоны, как показано на рис. 10.1.

Электрон, находящийся в полностью заполненной валентной зоне, не может участвовать в процессах теплопроводности и электропроводности. Поэтому при низкой температуре все полупроводники являются диэлектриками. Однако при повышении температуры небольшое количество электронов может перейти в зону проводимости. Закон дисперсии электронов вблизи дна зоны проводимости представляет собой квадратичную форму, которая может быть диагонализирована соответствующим выбором системы координат:

$$E_e = E_g + A_1 k_x^2 + A_2 k_y^2 + A_3 k_z^2, \quad \text{где } A_i > 0.$$

Для простоты мы полагаем, что $E_e^{\min} = E_e(\mathbf{k} = 0)$, как показано на рис. 10.1*a*. Таким образом, мы можем рассматривать электрон в зоне проводимости как свободную квазичастицу (которую мы для краткости будем называть просто «электрон») с тремя эффективными массами:

$$m_{e,i} = \frac{\hbar^2}{2A_i}, \quad \text{где } i=1,2,3.$$

Аналогично, закон дисперсии электрона в валентной зоне может быть представлен в виде:

$$E_e = -\left(B_1 k_x^2 + B_2 k_y^2 + B_3 k_z^2\right), \quad \text{где } B_i > 0.$$

Электронам, покинувшим валентную зону, удобно поставить в соответствие новый тип квазичастиц – «дырки». При этом $q_h = -q_e$, $s_h = s_e = 1/2$,

$$E_h = -E_e = B_1 k_x^2 + B_2 k_y^2 + B_3 k_z^2.$$

Мы отсчитываем энергию E_h дырок вниз от потолка валентной зоны, как показано на рис. 10.1. Дырка характеризуется тремя эффективными массами

$$m_{h,i} = \frac{\hbar^2}{2B_i}, \quad \text{где } i=1,2,3.$$

Во всех задачах, рассмотренных в разделах 10.2 и 10.3, мы будем считать, что $m_{e,1} = m_{e,2} = m_{e,3}$ и $m_{h,1} = m_{h,2} = m_{h,3}$.

В чистом полупроводнике концентрация n_e электронов равна концентрации n_h дырок, и полупроводник называют *собственным*. Однако баланс между электронами и дырками можно существенно изменить, если добавить в полупроводник примесные атомы. При этом если валентность атомов примеси на единицу больше, чем у атомов полупроводника, то такие атомы называются *донорами*. Лишние электроны образуют энергетический уровень E_d , который лежит ниже дна зоны проводимости (см. рис. 10.1б), и могут легко переходить в зону проводимости, увеличивая тем самым концентрацию электронов проводимости n_e . Если $n_e \gg n_h$, то полупроводник называется *полупроводником n-типа*. Если же валентность атомов примеси на единицу меньше, чем у атомов полупроводника, то такие атомы называются *акцепторами*. Акцепторный уровень энергии E_a лежит выше потолка валентной зоны, и на него могут переходить электроны из валентной зоны, увеличивая тем самым концентрацию дырок n_h . Если $n_h \gg n_e$, то полупроводник называется *полупроводником p-типа*.

2. Уравнение движения электронов и дырок. Если мы рассматриваем движение электронов и дырок на расстояниях, существенно превышающих межатомные, то мы можем использовать квазиклассические уравнения движения:

$$m_e \frac{d\mathbf{v}_e}{dt} = -|q_e|(\mathbf{E} + [\mathbf{v}_e \times \mathbf{B}]) \quad \text{и} \quad m_h \frac{d\mathbf{v}_h}{dt} = |q_e|(\mathbf{E} + [\mathbf{v}_h \times \mathbf{B}]), \quad (10.1)$$

где $m_e \equiv m_{e,1} = m_{e,2} = m_{e,3}$ и $m_h \equiv m_{h,1} = m_{h,2} = m_{h,3}$ – эффективные массы электронов и дырок, а \mathbf{v}_e и \mathbf{v}_h – их групповые скорости, $|q_e| = 1,6 \cdot 10^{-19}$ Кл – абсолютная величина заряда электрона.

Усредняя уравнения (10.1), получим:

$$m_e \left(\frac{d\langle \mathbf{v}_e \rangle}{dt} + \frac{\langle \mathbf{v}_e \rangle}{\tau_e} \right) = -|q_e|(\mathbf{E} + [\langle \mathbf{v}_e \rangle \times \mathbf{B}]), \quad (10.2a)$$

$$m_h \left(\frac{d\langle \mathbf{v}_h \rangle}{dt} + \frac{\langle \mathbf{v}_h \rangle}{\tau_h} \right) = |q_e|(\mathbf{E} + [\langle \mathbf{v}_h \rangle \times \mathbf{B}]), \quad (10.2б)$$

где $\langle \mathbf{v}_e \rangle$ и $\langle \mathbf{v}_h \rangle$ – средние скорости электронов и дырок, а τ_e и τ_h – времена их свободного пробега. Если $\mathbf{B} = 0$ и $\mathbf{E} = \text{const}$, то средние скорости $\langle \mathbf{v}_e \rangle$ и $\langle \mathbf{v}_h \rangle$ не зависят от времени, и из (10.2a) и (10.2б) получаем:

$$\langle \mathbf{v}_e \rangle = -\frac{|q_e|\tau_e}{m_e} \mathbf{E} \equiv -b_e \mathbf{E} \quad \text{и} \quad \langle \mathbf{v}_h \rangle = \frac{|q_e|\tau_h}{m_h} \mathbf{E} \equiv b_h \mathbf{E},$$

где $b_e = |q_e|\tau_e/m_e$ и $b_h = |q_e|\tau_h/m_h$ – подвижности электронов и дырок. В этом случае в кристалле будет течь постоянный ток, плотность которого равна

$$\mathbf{j} = -|q_e|n_e \langle \mathbf{v}_e \rangle + |q_e|n_h \langle \mathbf{v}_h \rangle = |q_e|(b_e n_e + b_h n_h) \mathbf{E} = \sigma \mathbf{E},$$

где $\sigma = |q_e|(b_e n_e + b_h n_h)$ – удельная проводимость полупроводника.

3. Эффект Холла. Рассмотрим пластинку из полупроводника, по которой течет электрический ток (рис. 10.2). Если эту пластинку

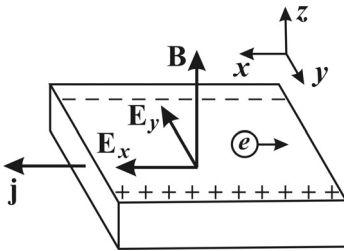


Рис. 10.2. Эффект Холла в полупроводнике n -типа.

поместить в постоянное магнитное поле \mathbf{B} , то на электроны и дырки будет действовать сила Лоренца. В результате на границах пластинки появляются электрические заряды, создающие поперечное электрическое поле, величина которого определяется из условия $j_y = 0$. Напря-

женность этого поля $E_H = E_y$ называется *напряженностью Холла*, а угол между вектором $\mathbf{E} = E_x \mathbf{e}_x + E_y \mathbf{e}_y$ и осью x – *углом Холла*. Напряженность Холла равна

$$E_H = R_H j B,$$

где R_H – коэффициент Холла, равный $R_{H,e} = -1/|q_e|n_e$ для полупроводника n -типа и $R_{H,h} = 1/|q_e|n_h$ для полупроводника p -

типа. Таким образом, измеряя разность потенциалов на краях пластинки, можно определить тип проводимости полупроводника.

4. Циклотронный резонанс. Поместим полупроводник в однородное магнитное поле \mathbf{B} . Пренебрегая процессами рассеяния электронов, из квазиклассических уравнений движения легко получить, что электроны будут двигаться по окружностям с частотой $\omega_c = |q_e|B/m_e$, называемой *циклотронной*.

Если в направлении, перпендикулярном магнитному полю, приложить переменное электрическое поле \mathbf{E} (см. рис. 10.3), то при частоте внешнего поля, близкой к ω_c , может

наблюдаться острый пик средней мощности поглощения. Это явление называется *циклотронным резонансом*. По положению и ширине пиков можно экспериментально определить эффективные массы и времена свободного пробега электронов и дырок.

5. Экситоны. При низких температурах электроны и дырки в полупроводнике могут образовывать связанные состояния – *экситоны*. Различают два типа экситонов: экситоны малого радиуса (*экситоны Френкеля*) и экситоны большого радиуса (*экситоны Ванье–Мотта*). Задача о нахождении уровней энергии экситона Ванье–Мотта может быть легко сведена к задаче о нахождении уровней энергии атома водорода (см. задачу 10.2.2).

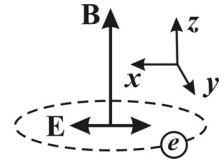


Рис. 10.3. Схема проведения эксперимента по циклотронному резонансу.

10.2. Задачи с решениями

Задача 10.2.1. Найти равновесные концентрации электронов n_e и дырок n_h в собственном полупроводнике при температуре T . Найти зависимость химического потенциала электронов μ_e от температуры. Полупроводник считать невырожденным, т.е. $E_g - \mu_e \gg kT$ и $\mu_e \gg kT$, где E_g – ширина запрещенной зоны полупроводника.

Решение

Энергию электронов будем отсчитывать от потолка валентной зоны (см. рис. 10.1), тогда энергия электронов вблизи дна зоны проводимости может быть представлена в виде:

$$E_e = E_g + \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_x^2}{m_{e,1}} + \frac{k_y^2}{m_{e,2}} + \frac{k_z^2}{m_{e,3}} \right).$$

Для упрощения дальнейших рассуждений будем считать, что $m_{e,1} = m_{e,2} = m_{e,3} \equiv m_e$. Тогда

$$E_e = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} = E_g + \frac{p^2}{2m_e},$$

и плотность состояний электронов можно записать в виде (см. задачу 8.3.1):

$$\rho_e(E_e) = V \frac{\sqrt{2m_e^{3/2}}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E_e - E_g}. \quad (10.3)$$

Среднее число электронов в одном квантовом состоянии определяется распределением Ферми-Дирака, которое при условии $E_g - \mu_e \gg kT$ переходит в распределение Больцмана:

$$\bar{n}_e = \frac{1}{\exp\left(\frac{E_e - \mu_e}{kT}\right) + 1} \approx \exp\left(\frac{\mu_e - E_e}{kT}\right). \quad (10.4)$$

Используя (10.3) и (10.4), вычислим концентрацию электронов в зоне проводимости:

$$n_e = \frac{1}{V} \int_{E_g}^{\infty} \rho_e(E_e) \bar{n}_e dE_e \approx \frac{\sqrt{2m_e^{3/2}}}{\pi^2 \hbar^3} \int_{E_g}^{\infty} \sqrt{E_e - E_g} \exp\left(\frac{\mu_e - E_e}{kT}\right) dE_e. \quad (10.5)$$

Чтобы вычислить интеграл в (10.5), сделаем замену переменных: $x = (E_e - E_g)/kT$ и воспользуемся определением гамма-функции:

$$\int_0^{\infty} \sqrt{x} e^{-x} dx = \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{1}{2} \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}. \text{ Окончательно получим}$$

$$n_e = N_e \exp\left(\frac{\mu_e - E_g}{kT}\right), \quad \text{где } N_e = 2 \left(\frac{m_e kT}{2\pi \hbar^2}\right)^{3/2}. \quad (10.6)$$

Энергия электронов вблизи потолка валентной зоны имеет вид:

$$E_e = -\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_x^2}{m_{h,1}} + \frac{k_y^2}{m_{h,2}} + \frac{k_z^2}{m_{h,3}} \right).$$

Для упрощения дальнейших рассуждений будем считать, что $m_{h,1} = m_{h,2} = m_{h,3} \equiv m_h$. Тогда

$$E_e = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_h} = -\frac{p^2}{2m_h}.$$

Если отсутствующему в валентной зоне электрону поставить в соответствие квазичастицу «дырку» и отсчитывать энергию дырок вниз от потолка валентной зоны (рис. 10.1), то энергия дырки равна

$$E_h = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h} = \frac{p^2}{2m_h},$$

а плотность состояний дырок –

$$\rho_h(E_h) = V \frac{\sqrt{2} m_h^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E_h}. \quad (10.7)$$

Среднее число дырок равно среднему числу электронов, отсутствующих в валентной зоне, т.е.

$$\bar{n}_h = 1 - \bar{n}_e = 1 - \frac{1}{\exp\left(\frac{E_e - \mu_e}{kT}\right) + 1} = \frac{1}{\exp\left(\frac{-E_e - (-\mu_e)}{kT}\right) + 1}. \quad (10.8)$$

Заметим, что если определить химический потенциал дырок, как $\mu_h = -\mu_e^*$, то выражение (10.8) будет совпадать с распределением Ферми-Дирака:

$$\bar{n}_h = \frac{1}{\exp\left(\frac{E_h - \mu_h}{kT}\right) + 1}.$$

При условии $\mu_e \gg kT$ выражение (10.8) можно записать в виде:

$$\bar{n}_h = \frac{1}{\exp\left(\frac{E_h + \mu_e}{kT}\right) + 1} \approx \exp\left(\frac{-E_h - \mu_e}{kT}\right). \quad (10.9)$$

Используя (10.7) и (10.9), вычислим концентрацию дырок в валентной зоне:

* Соотношение $\mu_h + \mu_e = 0$ с термодинамической точки зрения является условием рождения пар электрон-дырка.

$$n_h = \frac{1}{V} \int_0^\infty \rho_h(E_h) \bar{n}_h dE_h \approx \frac{\sqrt{2} m_h^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty \sqrt{E_h} \exp\left(\frac{-\mu_e - E_h}{kT}\right) dE_h. \quad (10.10)$$

Делая в (10.10) замену переменных $x = E_h/kT$ и вычисляя интеграл так же, как и в случае электронов, получим:

$$n_h = N_h \exp\left(\frac{-\mu_e}{kT}\right), \quad \text{где } N_h = 2 \left(\frac{m_h kT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}. \quad (10.11)$$

Для собственного полупроводника из условия электрической нейтральности следует, что $n_e = n_h \equiv n_i$. Тогда, используя (10.6) и (10.11), получим:

$$n_i^2 = n_e n_h = N_e N_h \exp\left(-\frac{E_g}{kT}\right),$$

откуда

$$n_e = n_h = \sqrt{N_e N_h} \exp\left(-\frac{E_g}{2kT}\right). \quad (10.12)$$

С другой стороны, из (10.6), (10.11) и равенства $n_e = n_h$ следует, что

$$N_e \exp\left(\frac{\mu_e - E_g}{kT}\right) = N_h \exp\left(\frac{-\mu_e}{kT}\right),$$

откуда можно найти зависимость химического потенциала μ_e от температуры

$$\mu_e = \frac{E_g}{2} + \frac{kT}{2} \ln\left(\frac{N_h}{N_e}\right) = \frac{E_g}{2} + \frac{3}{4} kT \ln\left(\frac{m_h}{m_e}\right). \quad (10.13)$$

Как правило, эффективная масса дырок m_h бывает несколько меньше эффективной массы электронов m_e , поэтому химический потенциал μ_e лежит чуть ниже середины запрещенной зоны.

Замечания.

1. Формула (10.13) для химического потенциала μ_e справедлива при выполнении двух условий: $E_g - \mu_e \gg kT$ и $\mu_e \gg kT$.

Поэтому, во-первых $E_g \gg kT$, а во-вторых, $\left| \ln\left(\frac{m_h}{m_e}\right) \right| \ll \frac{2}{3} \frac{E_g}{kT}$. Для реальных полупроводников второе условие выполняется всегда,

если выполняется первое. Таким образом, формулы (10.12) и (10.13) справедливы при условии $E_g \gg kT$. Если $E_g \sim kT$, то нельзя пренебрегать единицей в знаменателе распределения Ферми–Дирака, и вычисление интегралов, входящих в выражения (10.5) и (10.10), существенно усложняется.

2. Произведение концентраций электронов и дырок в полупроводнике является функцией только температуры:

$$n_i^2 = n_e n_h = N_e N_h \exp\left(-\frac{E_g}{kT}\right) \sim T^3 \exp\left(-\frac{E_g}{kT}\right). \quad (10.14)$$

Соотношение (10.14) является частным случаем известного из термодинамики закона действующих масс. Произведение $n_e n_h$ не зависит от концентрации примеси в полупроводнике, поэтому выражение (10.14) может быть использовано при обсуждении примесных полупроводников.

3. Оценим концентрацию n_i собственных носителей в чистом кремнии и германии при комнатной температуре, считая, что $m_e \approx m_h \approx m_0 = 9.1 \cdot 10^{-31}$ кг. Учитывая, что при комнатной температуре ширина запрещенной зоны кремния равна $E_g^{\text{Si}} = 1,14$ эВ, а германия – $E_g^{\text{Ge}} = 0,67$ эВ, получим:

$$n_i^{\text{Si}} \approx 2 \left(\frac{m_0 kT}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{E_g}{2kT}\right) = 3,2 \cdot 10^{15} \text{ м}^{-3} \quad \text{и} \quad n_i^{\text{Ge}} \approx 3,8 \cdot 10^{19} \text{ м}^{-3}.$$

Видно, что концентрация свободных носителей в полупроводниках существенно меньше, чем в металлах ($\sim 10^{28} - 10^{29} \text{ м}^{-3}$).

Ответ: $n_e = N_e \exp\left(\frac{\mu_e - E_g}{kT}\right)$, $n_h = N_h \exp\left(\frac{-\mu_e}{kT}\right)$, где

$$N_e = 2 \left(\frac{m_e kT}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2}, \quad N_h = 2 \left(\frac{m_h kT}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2};$$

$$\mu_e = \frac{E_g}{2} + \frac{3}{4} kT \ln\left(\frac{m_h}{m_e}\right).$$

Задача 10.2.2. Для некоторого полупроводника с диэлектрической проницаемостью ϵ и шириной запрещенной зоны E_g

известно положение донорного E_d и акцепторного E_a уровней энергии относительно потолка валентной зоны (см. рис. 10.1б). Используя теорию Бора, оценить: а) эффективную массу электронов m_e и дырок m_h ; б) эффективные линейные размеры областей локализации электронов и дырок, связанных с примесными центрами; в) уровни энергии E_n , энергию связи $E_{св}$ и линейные размеры экситонов Ванье–Мотта.

Решение

Согласно теории Бора, уровни энергии атома водорода и радиусы круговых орбит электрона равны (см. задачу 4.2.6) соответственно

$$E_n = -\frac{m_0 e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{Ry}{n^2} \quad \text{и} \quad r_n = \frac{\hbar^2}{m_0 e^2} n^2 = a_0 n^2, \quad (10.14)$$

где $m_0 = 9.1 \cdot 10^{-31}$ кг – масса электрона, $e^2 = |q_e|^2 / 4\pi\epsilon_0$, $Ry = 13,6$ эВ – энергия связи электрона в атоме водорода, $a_0 = 5,3 \cdot 10^{-11}$ м – радиус первой боровской орбиты атома водорода.

Применим теорию Бора к электрону, связанному с донорным атомом. Если считать, что электрон локализован в области, линейные размеры которой существенно превышают межатомное расстояние*, то необходимо учесть, что кулоновское взаимодействие между электроном и донорной примесью ослаблено в ϵ раз за счет поляризации полупроводника. Кроме того, эффективная масса m_e электрона в полупроводнике отличается от массы электрона в вакууме m_0 . Поэтому в формулах (10.14) сделаем замены $e^2 \rightarrow e^2/\epsilon$ и $m_0 \rightarrow m_e$. Тогда вместо (10.14) получим:

$$E_{n,d} = -\frac{m_e e^4}{2\hbar^2 \epsilon^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{Ry}{\epsilon^2 n^2} \left(\frac{m_e}{m_0} \right), \quad (10.15a)$$

$$r_{n,e} = \frac{\hbar^2 \epsilon}{m_e e^2} n^2 = a_0 \epsilon \left(\frac{m_0}{m_e} \right) n^2. \quad (10.15б)$$

* Далее мы увидим, что это предположение оправданно, см. замечания к задаче.

Из (10.15а) следует, что энергия связи электрона с донорной примесью равна

$$E_g - E_d = E_{св,d} = -E_{1,d} = \frac{Ry}{\epsilon^2} \left(\frac{m_e}{m_0} \right). \quad (10.16)$$

Исходя из соотношения (10.16), можно оценить эффективную массу электрона:

$$m_e = m_0 \epsilon^2 \frac{E_g - E_d}{Ry}. \quad (10.17)$$

В качестве оценки линейных размеров области локализации электрона можно использовать величину $r_{1,e}$. Принимая во внимание (10.15б) и (10.17), получим:

$$r_{1,e} = a_0 \epsilon \left(\frac{m_0}{m_e} \right) = \frac{a_0}{\epsilon} \frac{Ry}{E_g - E_d}. \quad (10.18)$$

Аналогично для дырок, связанных с акцепторной примесью,

$$m_h = m_0 \epsilon^2 \frac{E_a}{Ry} \quad \text{и} \quad r_{1,h} = \frac{a_0}{\epsilon} \frac{Ry}{E_a}, \quad (10.19)$$

поскольку $E_{св,a} = E_a$.

Экситон Ванье–Мотта – это связанное состояние электрона и дырки, находящиеся друг от друга на расстоянии, существенно превышающем межатомное. Поэтому для таких экситонов снова можно использовать формулы (10.14), сделав в них замены $e^2 \rightarrow e^2/\epsilon$ и $m_0 \rightarrow \mu$, где $\mu = m_e m_h / (m_e + m_h)$ – приведенная масса пары электрон-дырка. В результате получим:

$$E_{n,\epsilon} = -\frac{Ry}{\epsilon^2 n^2} \left(\frac{\mu}{m_0} \right) \quad \text{и} \quad r_{n,\epsilon} = a_0 \epsilon \left(\frac{m_0}{\mu} \right) n^2. \quad (10.20)$$

Подставляя эффективные массы электрона (10.17) и дырки (10.19) в выражения (10.20), получим

$$E_{n,\epsilon} = -\frac{(E_g - E_d)E_a}{E_g - E_d + E_a} \frac{1}{n^2} \quad \text{и} \quad r_{n,\epsilon} = \frac{a_0}{\epsilon} \frac{Ry \cdot (E_g - E_d + E_a)}{(E_g - E_d)E_a} n^2.$$

Отсюда энергия связи экситона и линейные размеры области его локализации равны

$$E_{\text{св,э}} = -E_{1,э} = \frac{(E_g - E_d)E_a}{E_g - E_d + E_a} \text{ и } r_{1,э} = \frac{a_0}{\epsilon} \frac{\text{Ry} \cdot (E_g - E_d + E_a)}{(E_g - E_d)E_a}. \quad (10.21)$$

Замечания.

1. Согласно (10.16), энергии связи электронов и дырок с атомами примеси не зависят от того, какие именно атомы мы рассматриваем, если они находятся в одной группе таблицы Менделеева. На самом деле это не совсем так. В качестве примера приведем энергии связи электронов с различными донорными примесями в кремнии: 0,045 эВ (фосфор), 0,049 эВ (мышьяк), 0,039 эВ (сурьма).

2. Используя формулы (10.17), (10.18), (10.19) и (10.21), сделаем численные оценки для кремния и германия. В качестве донорной примеси будем рассматривать атомы мышьяка, а в качестве акцепторной – атомы галлия. Для кремния $(E_g^{\text{Si}} - E_d^{\text{Si}}) = 0,049$ эВ, $E_a^{\text{Si}} = 0,065$ эВ и $\epsilon^{\text{Si}} = 12$, поэтому $m_e^{\text{Si}} \approx 0,5m_0$, $m_h^{\text{Si}} \approx 0,7m_0$, $r_{1,e}^{\text{Si}} \approx 23a_0 \approx 12 \text{ \AA}$, $r_{1,h}^{\text{Si}} \approx 17a_0 \approx 9 \text{ \AA}$, $E_{\text{св,э}}^{\text{Si}} = 0,028$ эВ, $r_{1,э}^{\text{Si}} \approx 41a_0 \approx 22 \text{ \AA}$. Для германия $(E_g^{\text{Ge}} - E_d^{\text{Ge}}) = 0,013$ эВ, $E_a^{\text{Ge}} = 0,011$ эВ и $\epsilon^{\text{Ge}} = 16$, поэтому $m_e^{\text{Ge}} \approx m_h^{\text{Ge}} \approx 0,2m_0$, $r_{1,e}^{\text{Ge}} \approx 65a_0 \approx 35 \text{ \AA}$, $r_{1,h}^{\text{Ge}} \approx 77a_0 \approx 41 \text{ \AA}$, $E_{\text{св,э}}^{\text{Ge}} = 0,006$ эВ, $r_{1,э}^{\text{Ge}} \approx 143a_0 \approx 76 \text{ \AA}$. Сравнивая $r_{1,e}$ и $r_{1,h}$ с постоянными решетки кремния $a^{\text{Si}} = 5,43 \text{ \AA}$ и германия $a^{\text{Ge}} = 5,66 \text{ \AA}$, видим, что условие $r_{1,e}, r_{1,h} \gg a$ для германия выполняется лучше, чем для кремния.

3. Вычисленные по формулам (10.17) и (10.19) эффективные массы электронов и дырок лишь по порядку величины согласуются с их значениями, полученными более точными методами.

Ответ: а) $m_e = m_0 \epsilon^2 \frac{E_g - E_d}{\text{Ry}}$, $m_h = m_0 \epsilon^2 \frac{E_a}{\text{Ry}}$;

б) $r_{1,e} = \frac{a_0}{\epsilon} \frac{\text{Ry}}{E_g - E_d}$, $r_{1,h} = \frac{a_0}{\epsilon} \frac{\text{Ry}}{E_a}$;

в) $E_{n,э} = -\frac{(E_g - E_d)E_a}{E_g - E_d + E_a} \frac{1}{n^2}$, $E_{\text{св,э}} = \frac{(E_g - E_d)E_a}{E_g - E_d + E_a}$,

$$r_{1,3} = \frac{a_0}{\varepsilon} \frac{\text{Ry} \cdot (E_g - E_d + E_a)}{(E_g - E_d)E_a}.$$

Задача 10.2.3. Найти равновесные концентрации электронов n_e и дырок n_h в полупроводнике с донорной примесью при температуре T . Найти зависимость химического потенциала электронов μ_e от температуры. При решении задачи считать, что $E_g - E_d \ll kT \ll E_g - \mu_e$, где E_g – ширина запрещенной зоны полупроводника, а E_d – энергия донорного уровня (см. рис. 10.1б).

Решение

Условие $E_g - \mu_e \gg kT$ означает, что полупроводник является невырожденным, т.е. среднее число заполнения квантовых состояний электронов в зоне проводимости \bar{n}_e , так же как и в **задаче 10.2.1**, определяется распределением Больцмана (10.4). Далее мы увидим, что при добавлении донорной примеси химический потенциал μ_e смещается вверх относительно середины запрещенной зоны, поэтому из условия $E_g - \mu_e \gg kT$ автоматически следует, что $\mu_e \gg kT$. Таким образом, остается справедливым закон действующих масс (10.14):

$$n_i^2 = n_e n_h = N_e N_h \exp\left(-\frac{E_g}{kT}\right),$$

где $N_e = 2\left(\frac{m_e kT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}$ и $N_h = 2\left(\frac{m_h kT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}$. Так же, как и в **задаче**

10.2.1, будем считать, что полупроводник можно характеризовать одной эффективной массой электронов m_e и одной эффективной массой дырок m_h .

Условие $E_g - E_d \ll kT$ означает, что рассматриваемые температуры достаточно высоки и почти все примесные атомы ионизованы. Будем считать, что все атомы примеси однократно ионизованы. Тогда из условия электрической нейтральности полупроводника следует, что $n_e = n_h + N_d$, где N_d – концентрация донорных атомов.

Решение задачи существенно зависит от соотношения между концентрациями примеси N_d и собственных носителей n_i в чистом полупроводнике.

Найдем сначала выражения для n_e и n_h , которые справедливы для любых соотношений между n_i и N_d . Для этого умножим условие электронейтральности $n_e = n_h + N_d$ на n_e и, используя соотношение $n_e n_h = n_i^2 \frac{n!}{r!(n-r)!}$, получим квадратное уравнение относительно n_e :

$$n_e^2 - N_d n_e - n_i^2 = 0. \quad (10.22)$$

Решая (10.22), получим:

$$n_e = \frac{N_d}{2} \left[\sqrt{1 + \frac{4n_i^2}{N_d^2}} + 1 \right]. \quad (10.23)$$

Аналогичное выражение можно получить для концентрации дырок:

$$n_h = \frac{N_d}{2} \left[\sqrt{1 + \frac{4n_i^2}{N_d^2}} - 1 \right]. \quad (10.24)$$

Рассмотрим далее отдельно два предельных случая: $N_d \ll n_i$ и $N_d \gg n_i$.

Случай 1. Концентрация примеси мала: $N_d \ll n_i$. При этом

$$\sqrt{1 + \frac{4n_i^2}{N_d^2}} \approx \frac{2n_i}{N_d}, \text{ и из (10.23) и (10.24) получаем:}$$

$$n_e \approx n_i + \frac{N_d}{2}, \quad (10.25a)$$

$$n_h \approx n_i - \frac{N_d}{2}. \quad (10.25b)$$

Выражение для химического потенциала можно получить из соотношения (10.25a), используя формулы (10.6) и (10.12):

$$N_e \exp\left(\frac{\mu_e - E_g}{kT}\right) = \sqrt{N_e N_h} \exp\left(-\frac{E_g}{2kT}\right) + \frac{N_d}{2}. \quad (10.26)$$

Логарифмируя (10.26), найдем:

$$\begin{aligned}\mu_e &= \frac{E_g}{2} + \frac{1}{2}kT \ln\left(\frac{N_h}{N_e}\right) + kT \ln\left(1 + \frac{N_d}{2n_i}\right) \approx \\ &\approx \frac{E_g}{2} + \frac{3}{4}kT \ln\left(\frac{m_h}{m_e}\right) + \frac{N_d}{2n_i}kT.\end{aligned}\quad (10.27)$$

Сравнивая (10.27) с (10.13), видим, что при малых концентрациях N_d донорной примеси химический потенциал μ_e увеличивается прямо пропорционально N_d .

Случай 2. Концентрация примеси велика: $N_d \gg n_i$. В этом

случае $\sqrt{1 + \frac{4n_i^2}{N_d^2}} \approx 1 + \frac{2n_i^2}{N_d^2}$, и

из (10.23) и (10.24) получаем:

$$n_e \approx N_d + \frac{n_i^2}{N_d} \approx N_d, \quad (10.28a)$$

$$n_h \approx \frac{n_i^2}{N_d}. \quad (10.28б)$$

Выражение для химического потенциала можно получить из соотношения (10.28a), используя формулу (10.6):

$$N_e \exp\left(\frac{\mu_e - E_g}{kT}\right) = N_d. \quad (10.29)$$

Логарифмируя (10.29), найдем:

$$\begin{aligned}\mu_e &\approx E_g + kT \ln\left(\frac{N_d}{N_e}\right) = E_g + kT \ln\left(\frac{N_d}{\sqrt{N_e N_h}} \sqrt{\frac{N_h}{N_e}}\right) = \\ &= \frac{E_g}{2} + kT \ln\left(\frac{N_d}{n_i} \sqrt{\frac{N_h}{N_e}}\right) = \frac{E_g}{2} + \frac{3}{4}kT \ln\left(\frac{m_h}{m_e}\right) + kT \ln\left(\frac{N_d}{n_i}\right).\end{aligned}\quad (10.30)$$

Таким образом, при больших концентрациях N_d донорной примеси химический потенциал μ_e увеличивается пропорционально логарифму от N_d/n_i .

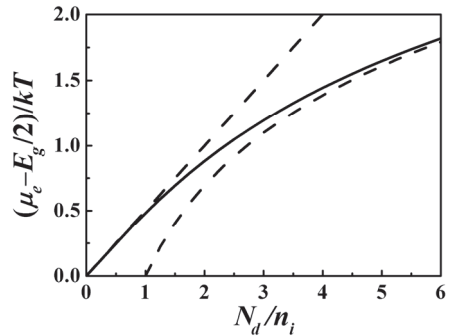


Рис. 10.4. Зависимость величины $(\mu_e - E_g/2)/kT$ от N_d/n_i для случая $m_e = m_h$. Штриховыми линиями показаны приближенные решения, справедливые при $N_d/n_i \ll 1$ и $N_d/n_i \gg 1$.

Зависимости величины $(\mu_e - E_g/2)/kT$ от относительной концентрации донорной примеси N_d/n_i для случая $m_e = m_h$ приведены на рис. 10.4. Штриховыми линиями показаны приближенные решения (10.27) и (10.30), сплошной линией – точное решение.

Замечание. При решении задачи предполагалось, что $E_g - E_d \ll kT$. Посмотрим, насколько хорошо это приближение выполняется в случае кремния и германия при комнатной температуре. Разность $E_g - E_d$ равна энергии связи $E_{\text{св}}$ электрона с донорной примесью. Согласно задаче 10.2.2, $E_{\text{св}}^{\text{Si}} \approx 0,049$ эВ и $E_{\text{св}}^{\text{Ge}} \approx 0,013$ эВ. Сравнивая эти значения с $kT_{\text{к}} \approx 0,025$ эВ, мы видим, что условие $E_g - E_d \ll kT_{\text{к}}$ можно считать приближенно выполненным для германия. Однако в случае кремния выполняется обратное неравенство $E_g - E_d > kT_{\text{к}}$, и предложенное решение задачи оказывается некорректным.

$$\text{Ответ: } n_e = \frac{N_d}{2} \left[\sqrt{1 + \frac{4n_i^2}{N_d^2}} + 1 \right], \quad n_h = \frac{N_d}{2} \left[\sqrt{1 + \frac{4n_i^2}{N_d^2}} - 1 \right];$$

$$\mu_e \approx \frac{E_g}{2} + \frac{3}{4} kT \ln \left(\frac{m_h}{m_e} \right) + \frac{N_d}{2n_i} kT, \quad \text{при } N_d \ll n_i;$$

$$\mu_e \approx \frac{E_g}{2} + \frac{3}{4} kT \ln \left(\frac{m_h}{m_e} \right) + kT \ln \left(\frac{N_d}{n_i} \right), \quad \text{при } N_d \gg n_i,$$

$$\text{где } n_i = 2 \left(\frac{\sqrt{m_e m_h} kT}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{E_g}{2kT} \right).$$

Задача 10.2.4. Найти равновесные концентрации электронов n_e и дырок n_h в полупроводнике с донорной примесью при температуре T . Найти зависимость химического потенциала электронов μ_e от температуры. При решении задачи считать, что выполнены неравенства $E_g - \mu_e \gg kT$ и $\mu_e - E_d \gg kT$, где E_g – ширина запрещенной зоны полупроводника, а E_d – донорный энергетический уровень (см. рис. 10.5).

Решение

Из условий $E_g - \mu_e \gg kT$ и $\mu_e - E_d \gg kT$ следует, что полупроводник является невырожденным. При этом химический потенциал лежит выше донорного энергетического уровня, поэтому большинство атомов примеси остается неионизованными. Концентрацию n_d ионизованных атомов примеси можно определить, исходя из распределения Ферми–Дирака

$$n_d = N_d \left(1 - \frac{1}{\exp\left(\frac{E_d - \mu_e}{kT}\right) + 1} \right) = \frac{N_d}{\exp\left(\frac{\mu_e - E_d}{kT}\right) + 1}, \quad (10.31)$$

где N_d – концентрация атомов примеси. С учетом условия $\mu_e - E_d \gg kT$, можно записать выражение (10.31) в более простом виде:

$$n_d = N_d \exp\left(\frac{E_d - \mu_e}{kT}\right), \quad n_d \ll N_d. \quad (10.32)$$

Так же, как и в задаче 10.2.3, из условия электрической нейтральности полупроводника $n_e = n_h + n_d$ получаем выражения, аналогичные (10.23) и (10.24):

$$\begin{aligned} n_e &= \frac{n_d}{2} \left[\sqrt{1 + \frac{4n_i^2}{n_d^2}} + 1 \right], \\ n_h &= \frac{n_d}{2} \left[\sqrt{1 + \frac{4n_i^2}{n_d^2}} - 1 \right], \end{aligned} \quad (10.33)$$

где n_i – концентрация собственных носителей в чистом полупроводнике. Условие $\mu_e - E_d \gg kT$ может быть выполнено только при $n_d \gg n_i$, поэтому из (10.33) следует, что $n_e \approx n_d$. Используя (10.6) и (10.32), запишем равенство $n_e \approx n_d$ в виде:

$$N_e \exp\left(\frac{\mu_e - E_g}{kT}\right) = N_d \exp\left(\frac{E_d - \mu_e}{kT}\right). \quad (10.34)$$

Логарифмируя (10.34), найдем химический потенциал

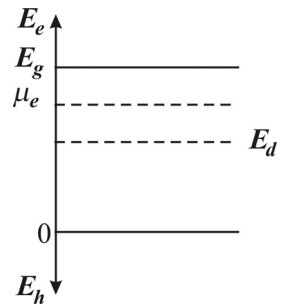


Рис. 10.5. Энергетическая диаграмма для случая $E_g < \mu_e < E_d$, соответствующего большой концентрации донорных атомов.

$$\mu_e = \frac{1}{2}(E_g + E_d) + \frac{kT}{2} \ln\left(\frac{N_d}{N_e}\right), \quad (10.35)$$

где $N_e = 2\left(\frac{m_e kT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}$. Таким образом, при $N_d \approx N_e$ химический потенциал μ_e лежит посередине между донорным энергетическим уровнем и дном зоны проводимости.

Подставляя (10.35) в выражение (10.6), получим:

$$n_e = N_e \exp\left(\frac{\mu_e - E_g}{kT}\right) = \sqrt{N_e N_d} \exp\left(\frac{E_d - E_g}{2kT}\right).$$

Используя выражения (10.33), (10.14), (10.32) и (10.35), найдем концентрацию дырок:

$$n_h = \frac{n_d}{2} \left[\sqrt{1 + \frac{4n_i^2}{n_d^2}} - 1 \right] \approx \frac{n_i^2}{n_d} = N_h \sqrt{\frac{N_e}{N_d}} \exp\left(-\frac{E_g + E_d}{2kT}\right).$$

Замечание. При решении задачи предполагалось, что $E_g - \mu_e \gg kT$ и $\mu_e - E_d \gg kT$. Посмотрим, при каких температурах это приближение выполняется в случае кремния и германия. Величина $E_g - E_d$ равна энергии связи $E_{\text{св}}$ электрона с донорной примесью. Согласно задаче 10.2.2, $E_{\text{св}}^{\text{Si}} \approx 0,049$ эВ и $E_{\text{св}}^{\text{Ge}} \approx 0,013$ эВ. Будем считать, что химический потенциал лежит ровно посередине между E_d и E_g . Тогда должно выполняться неравенство $E_{\text{св}} \gg 2kT$, т.е. рассмотренное приближение справедливо при температурах $T \ll \frac{E_{\text{св}}^{\text{Si}}}{2k} \sim 285$ К для кремния и $T \ll \frac{E_{\text{св}}^{\text{Ge}}}{2k} \sim 75$ К для германия. При этом концентрация донорной примеси должна быть достаточно большой, чтобы выполнялось неравенство $kT \ln\left(\frac{N_e}{N_d}\right) \ll E_g - E_d$.

Ответ: $n_e = \sqrt{N_e N_d} \exp\left(\frac{E_d - E_g}{2kT}\right),$

$$n_h = N_h \sqrt{\frac{N_e}{N_d}} \exp\left(-\frac{E_g + E_d}{2kT}\right),$$

$$\mu_e = \frac{1}{2}(E_g + E_d) + \frac{kT}{2} \ln\left(\frac{N_d}{N_e}\right),$$

где

$$N_e = 2\left(\frac{m_e kT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \quad \text{и} \quad N_h = 2\left(\frac{m_h kT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}.$$

Задача 10.2.5. Известно, что в некотором полупроводнике концентрации электронов и дырок равны n_e и n_h , а их подвижности b_e и b_h соответственно. Пластика из этого полупроводника помещена в однородное магнитное поле B , как показано на рис. 10.2. Найти тангенс угла Холла $\operatorname{tg} \theta$ и коэффициент Холла R_H . При решении задачи считать магнитное поле слабым, т.е. $b_e B \ll 1$ и $b_h B \ll 1$.

Решение

Будем считать, что движение электронов и дырок в полупроводнике можно характеризовать одной эффективной массой m_e электронов и одной эффективной массой m_h дырок. Поскольку рассматривается движение электронов и дырок в постоянных электрическом и магнитном полях, то уравнения для их средних скоростей $\langle \mathbf{v}_e \rangle$ и $\langle \mathbf{v}_h \rangle$ будут иметь вид (см. (10.2a) и (10.2б)):

$$m_e \frac{\langle \mathbf{v}_e \rangle}{\tau_e} = -|q_e|(\mathbf{E} + [\langle \mathbf{v}_e \rangle \times \mathbf{B}]), \quad (10.36a)$$

$$m_h \frac{\langle \mathbf{v}_h \rangle}{\tau_h} = |q_e|(\mathbf{E} + [\langle \mathbf{v}_h \rangle \times \mathbf{B}]), \quad (10.36б)$$

где $|q_e| = 1,6 \cdot 10^{-19}$ Кл – абсолютная величина заряда электрона, а τ_e и τ_h – времена свободного пробега электронов и дырок соответственно.

Выберем декартовы оси координат, как показано на рис. 10.2, тогда индукция магнитного поля будет направлена вдоль оси z ,

т.е. $\mathbf{V} = V\mathbf{e}_z$. Уравнения движения электрона (10.36а) в проекциях на оси x и y будут иметь вид:

$$m_e \frac{\langle v_{e,x} \rangle}{\tau_e} = -|q_e|E_x - |q_e|B \langle v_{e,y} \rangle,$$

$$m_e \frac{\langle v_{e,y} \rangle}{\tau_e} = -|q_e|E_y + |q_e|B \langle v_{e,x} \rangle.$$

Используя определение подвижности электронов $b_e = |q_e|\tau_e/m_e$, перепишем эту систему уравнений в более простом виде:

$$\langle v_{e,x} \rangle = -b_e E_x - b_e B \langle v_{e,y} \rangle, \quad (10.37a)$$

$$\langle v_{e,y} \rangle = -b_e E_y + b_e B \langle v_{e,x} \rangle. \quad (10.37б)$$

Выражая $\langle v_{e,x} \rangle$ из уравнения (10.37а) и подставляя в (10.37б), получим:

$$\langle v_{e,y} \rangle = -b_e E_y - b_e^2 B E_x - (b_e B)^2 \langle v_{e,y} \rangle. \quad (10.38)$$

Поскольку по условию задачи магнитное поле слабое ($b_e B \ll 1$), то в (10.38) можно пренебречь слагаемым $(b_e B)^2 \langle v_{e,y} \rangle$.

Тогда

$$\langle v_{e,y} \rangle = -b_e E_y - b_e^2 B E_x. \quad (10.39)$$

Аналогично, рассматривая уравнение движения (10.36б) для дырок, получим:

$$\langle v_{h,y} \rangle = b_h E_y - b_h^2 B E_x. \quad (10.40)$$

Используя выражения (10.39) и (10.40), найдем проекцию плотности тока на ось y :

$$\begin{aligned} j_y &= -|q_e|n_e \langle v_{e,y} \rangle + |q_e|n_h \langle v_{h,y} \rangle = \\ &= |q_e| \left[n_e b_e E_y + n_e b_e^2 B E_x + n_h b_h E_y - n_h b_h^2 B E_x \right]. \end{aligned} \quad (10.41)$$

В равновесном состоянии $j_y = 0$, и из (10.41) следует равенство:

$$(n_e b_e + n_h b_h) E_y = (n_h b_h^2 - n_e b_e^2) B E_x. \quad (10.42)$$

Из соотношения (10.42) легко найти тангенс угла Холла:

$$\operatorname{tg} \theta = \frac{E_y}{E_x} = \frac{n_h b_h^2 - n_e b_e^2}{n_e b_e + n_h b_h} B. \quad (10.43)$$

Чтобы получить выражение для коэффициента Холла R_H с той же степенью точности, можно считать, что $\langle v_{e,x} \rangle \approx -b_e E_x$ и $\langle v_{h,x} \rangle \approx b_h E_x$. Тогда плотность тока равна

$$j = j_x = -|q_e| n_e \langle v_{e,x} \rangle + |q_e| n_h \langle v_{h,x} \rangle \approx |q_e| (n_e b_e + n_h b_h) E_x. \quad (10.44)$$

Используя (10.43) и (10.44), напряженность Холла можно записать в виде:

$$E_H = E_y = E_x \operatorname{tg} \theta = \frac{j}{|q_e| (n_e b_e + n_h b_h)} \cdot \frac{n_h b_h^2 - n_e b_e^2}{n_e b_e + n_h b_h} B \equiv R_H j B,$$

где

$$R_H = \frac{n_h b_h^2 - n_e b_e^2}{|q_e| (n_e b_e + n_h b_h)^2} \quad (10.45)$$

– коэффициент Холла.

Замечание. Рассмотрим предельные случаи полупроводников n -типа ($n_e \gg n_h$) и p -типа ($n_h \gg n_e$). Из (10.43) и (10.45) получим:

$$\operatorname{tg} \theta = \begin{cases} -b_e B, & \text{если } n_e \gg n_h, \\ b_h B, & \text{если } n_h \gg n_e, \end{cases} \quad \text{и} \quad R_H = \begin{cases} -1/|q_e| n_e, & \text{если } n_e \gg n_h, \\ 1/|q_e| n_h, & \text{если } n_h \gg n_e. \end{cases}$$

$$\textbf{Ответ:} \quad \operatorname{tg} \theta = \frac{n_h b_h^2 - n_e b_e^2}{n_e b_e + n_h b_h} B, \quad R_H = \frac{n_h b_h^2 - n_e b_e^2}{|q_e| (n_e b_e + n_h b_h)^2}.$$

Задача 10.2.6. Рассмотрим типичную схему проведения эксперимента по циклотронному резонансу (см. рис. 10.3). Пусть постоянное магнитное поле направлено вдоль оси z ($\mathbf{B} = B \mathbf{e}_z$), а переменное электрическое поле – вдоль оси x ($\mathbf{E} = E_0 \mathbf{e}_x \cos(\omega t)$). Найти среднюю мощность $\langle P \rangle$, поглощаемую полупроводником, и условие, необходимое для наблюдения циклотронного резонанса. Рассмотреть полупроводник n -типа ($n_e \gg n_h$), считая, что среднее время τ_e свободного пробега и эффективная масса m_e электронов заданы.

Решение

Поскольку мы рассматриваем полупроводник n -типа, то будем обсуждать только движение электронов проводимости. Кроме того, будем считать, что их можно характеризовать одной эффективной массой m_e и одним временем свободного пробега τ_e . Тогда уравнение для средней скорости электрона $\langle \mathbf{v}_e \rangle$ будет иметь вид (10.2а):

$$m_e \left(\frac{d\langle \mathbf{v}_e \rangle}{dt} + \frac{\langle \mathbf{v}_e \rangle}{\tau_e} \right) = -|q_e| (\mathbf{E} + [\langle \mathbf{v}_e \rangle \times \mathbf{B}]),$$

где $|q_e| = 1,6 \cdot 10^{-19}$ Кл – абсолютная величина заряда электрона. Выбирая декартовы оси координат, как показано на рис. 10.3, и учитывая, что $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$ и $\mathbf{E} = E_0\mathbf{e}_x \cos(\omega t)$, запишем уравнение движения в проекциях на оси x , y и z :

$$m_e \left(\frac{d\langle v_{e,x} \rangle}{dt} + \frac{\langle v_{e,x} \rangle}{\tau_e} \right) = -|q_e| E_0 \cos(\omega t) - |q_e| B \langle v_{e,y} \rangle, \quad (10.46a)$$

$$m_e \left(\frac{d\langle v_{e,y} \rangle}{dt} + \frac{\langle v_{e,y} \rangle}{\tau_e} \right) = |q_e| B \langle v_{e,x} \rangle, \quad (10.46б)$$

$$m_e \left(\frac{d\langle v_{e,z} \rangle}{dt} + \frac{\langle v_{e,z} \rangle}{\tau_e} \right) = 0. \quad (10.46в)$$

Решим сначала уравнение (10.46в). Разделяя переменные $\langle v_{e,z} \rangle$ и t , получим:

$$\frac{d\langle v_{e,z} \rangle}{\langle v_{e,z} \rangle} = -\frac{dt}{\tau_e},$$

откуда

$$\langle v_{e,z} \rangle(t) = \langle v_{e,z} \rangle(0) \cdot \exp\left(-\frac{t}{\tau_e}\right). \quad (10.47)$$

Из (10.47) видно, что даже если в начальный момент времени имело место направленное движение электронов вдоль оси z , то оно затухает в течение времени порядка τ_e . Таким образом, движение электронов вдоль направления магнитного поля не представляет интереса в рамках данной задачи.

Чтобы решить систему уравнений (10.46a) и (10.46б), перейдем к комплексным величинам:

$$\tilde{v}_x = \tilde{v}_{x,0} e^{i\omega t}, \quad \tilde{v}_y = \tilde{v}_{y,0} e^{i\omega t}, \quad \tilde{E}_x = E_0 e^{i\omega t}, \quad (10.48)$$

при этом $\langle v_{e,x} \rangle = \text{Re} \tilde{v}_x$, $\langle v_{e,y} \rangle = \text{Re} \tilde{v}_y$ и $E_x = E_0 \cos(\omega t) = \text{Re} \tilde{E}_x$. Подставляя (10.48) в уравнения (10.46a) и (10.46б), получим систему алгебраических уравнений:

$$m_e \left(i\omega + \frac{1}{\tau_e} \right) \tilde{v}_{x,0} = -|q_e| B \tilde{v}_{y,0} - |q_e| E_0, \quad (10.49a)$$

$$m_e \left(i\omega + \frac{1}{\tau_e} \right) \tilde{v}_{y,0} = |q_e| B \tilde{v}_{x,0}. \quad (10.49б)$$

Выразив скорость $\tilde{v}_{y,0}$ из уравнения (10.49б) и подставив её в (10.49a), получим:

$$\tilde{v}_{x,0} = -\frac{|q_e| E_0 \tau_e}{m_e} \frac{1 + i\omega \tau_e}{1 + (\omega_c^2 - \omega^2) \tau_e^2 + 2i\omega \tau_e}, \quad (10.50)$$

где $\omega_c \equiv \frac{|q_e| B}{m_e}$ – циклотронная частота.

Найдем теперь среднюю мощность $\langle P \rangle$ в расчете на один электрон проводимости, которую поглощает полупроводник. Для этого сначала найдем мгновенную мощность действующей на электрон силы:

$$P(t) = (\mathbf{F} \cdot \langle \mathbf{v}_e \rangle) = -|q_e| E_x \langle v_{e,x} \rangle = -|q_e| \cdot E_0 \cos(\omega t) \cdot \text{Re} \tilde{v}_x. \quad (10.51)$$

Входящую в (10.51) вещественную часть \tilde{v}_x удобно записать в виде:

$$\text{Re} \tilde{v}_x = \text{Re} \left(\tilde{v}_{x,0} e^{i\omega t} \right) = \text{Re} \tilde{v}_{x,0} \cdot \cos(\omega t) - \text{Im} \tilde{v}_{x,0} \cdot \sin(\omega t). \quad (10.52)$$

Подставляя (10.52) и (10.50) в (10.51) и усредняя по времени, найдем среднюю мощность, поглощаемую одним электроном:

$$\begin{aligned} \langle P \rangle &= -|q_e| \cdot E_0 \langle \cos^2(\omega t) \rangle \cdot \text{Re} \tilde{v}_{x,0} + |q_e| \cdot E_0 \langle \sin(\omega t) \cos(\omega t) \rangle \cdot \text{Im} \tilde{v}_{x,0} = \\ &= -\frac{|q_e| \cdot E_0}{2} \text{Re} \tilde{v}_{x,0} = \frac{|q_e|^2 E_0^2 \tau_e}{2m_e} \text{Re} \left[\frac{1 + i\omega \tau_e}{1 + (\omega_c^2 - \omega^2) \tau_e^2 + 2i\omega \tau_e} \right] = \end{aligned}$$

$$= \frac{|q_e|^2 E_0^2 \tau_e}{2m_e} \frac{1 + (\omega_c^2 + \omega^2) \tau_e^2}{\left[1 + (\omega_c^2 - \omega^2) \tau_e^2\right]^2 + 4\omega^2 \tau_e^2}. \quad (10.53)$$

Чтобы получить мощность, поглощаемую в единице объема полупроводника, необходимо умножить (10.53) на концентрацию электронов проводимости n_e , вычислению которой в различных случаях были посвящены задачи **10.2.1**, **10.2.3** и **10.2.4**.

Чтобы понять, в каком случае будет наблюдаться циклотронный резонанс, рассмотрим поведение функции

$$f(\omega) = \frac{1 + (\omega_c^2 + \omega^2) \tau_e^2}{\left[1 + (\omega_c^2 - \omega^2) \tau_e^2\right]^2 + 4\omega^2 \tau_e^2} \quad (10.54)$$

в двух предельных случаях: $\omega_c \tau_e \gg 1$ и $\omega_c \tau_e \ll 1$.

Случай 1. При $\omega_c \tau_e \gg 1$ можно пренебречь единицами в числителе и знаменателе (10.54). Тогда

$$f(\omega) \approx \frac{(\omega_c^2 + \omega^2) \tau_e^2}{2(\omega_c^2 + \omega^2) \tau_e^2 + (\omega_c^2 - \omega^2)^2 \tau_e^4} = \begin{cases} \frac{1}{(\omega_c \tau_e)^2}, & \text{при } \omega \ll \omega_c, \\ \frac{1}{2[1 + (\Delta\omega \tau_e)^2]}, & \text{при } \omega \approx \omega_c, \\ \frac{1}{(\omega \tau_e)^2}, & \text{при } \omega \gg \omega_c, \end{cases}$$

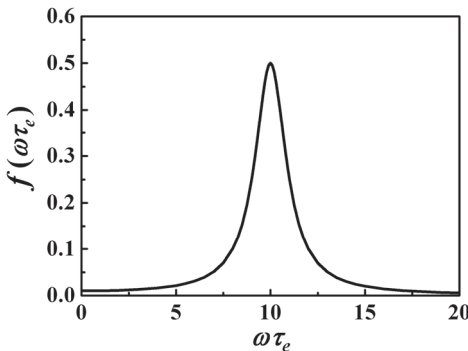


Рис. 10.6. Резонансная кривая при $\omega_c \tau_e = 10$.

где $\Delta\omega = \omega - \omega_c$. Видно, что функция $f(\omega)$ имеет максимум $f_{\max} = 1/2$ при частоте $\omega = \omega_c$, т.е. наблюдается резонансное поглощение энергии электромагнитного поля. Функция $f(\omega)$ уменьшается вдвое при значениях $\Delta\omega = \pm 1/\tau_e$, т.е. ширина резонансного пика на

половине его высоты составляет $2/\tau_e$. График функции $f(\omega\tau_e)$ при $\omega_c\tau_e=10$ изображен на рис. 10.6. Таким образом, из экспериментальных данных по циклотронному резонансу можно определить как циклотронную частоту ω_c (а следовательно, и эффективную массу электрона $m_e = |q_e|B/\omega_c$), так и время свободного пробега электрона τ_e .

Случай 2. При $\omega_c\tau_e \ll 1$ можно пренебречь в (10.54) величиной $\omega_c\tau_e$ по сравнению с единицей. Тогда

$$f(\omega) \approx \frac{1 + \omega^2\tau_e^2}{\left[1 - \omega^2\tau_e^2\right]^2 + 4\omega^2\tau_e^2} = \frac{1}{1 + \omega^2\tau_e^2}.$$

Функция $f(\omega)$ монотонно убывает с увеличением частоты и не имеет резонансного пика.

Таким образом, циклотронный резонанс наблюдается, если $\omega_c\tau_e \gg 1$, и не наблюдается при $\omega_c\tau_e \ll 1$. Поэтому условием возникновения циклотронного резонанса можно считать неравенство

$$\omega_c\tau_e > 1,$$

которое с классической точки зрения означает, что электрон должен сделать хотя бы один оборот за время, равное среднему времени свободного пробега.

Замечание. В реальном эксперименте по циклотронному резонансу обычно наблюдается несколько резонансов, соответствующих электронам и дыркам с различными эффективными массами. Поэтому циклотронный резонанс стал одним из незаменимых экспериментальных методов исследования полупроводниковых (и металлических) кристаллов. При этом массы квазичастиц, полученные из экспериментов по циклотронному резонансу, несколько отличаются от их эффективных масс, поэтому используют термин *циклотронная масса*.

$$\text{Ответ: } \langle P \rangle = \frac{|q_e|^2 E_0^2 \tau_e}{2m_e} \frac{1 + (\omega_c^2 + \omega^2)\tau_e^2}{\left[1 + (\omega_c^2 - \omega^2)\tau_e^2\right]^2 + 4\omega^2\tau_e^2},$$

где $\omega_c = \frac{|q_e|B}{m_e}$; условием, необходимым для наблюдения циклотронного резонанса, можно считать неравенство $\omega_c \tau_e > 1$.

10.3. Короткие задачи

Задача 10.3.1. Найти ширину запрещенной зоны E_g собственного полупроводника, у которого проводимость σ возрастает в $\xi = 5$ раз при увеличении температуры от $T_1 = 300$ К до $T_2 = 400$ К.

Решение

Поскольку концентрации электронов и дырок в собственном полупроводнике равны (см. задачу 10.2.1)

$$n_e = n_h = \sqrt{N_e N_h} \exp\left(-\frac{E_g}{2kT}\right),$$

то его проводимость зависит от температуры как

$$\sigma(T) = |q_e|(b_e n_e + b_h n_h) = |q_e|(b_e + b_h) \sqrt{N_e N_h} \exp\left(-\frac{E_g}{2kT}\right).$$

Отсюда

$$\xi = \frac{\sigma(T_2)}{\sigma(T_1)} = \exp\left[\frac{E_g}{2k} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}\right)\right]. \quad (10.55)$$

Выражая из (10.55) E_g , найдем:

$$E_g = \frac{2kT_1 T_2 \ln \xi}{T_2 - T_1} = \frac{2 \cdot 0,025 \text{ эВ} \cdot 400 \text{ К}}{100 \text{ К}} = 0,32 \text{ эВ}.$$

Ответ: $E_g = \frac{2kT_1 T_2 \ln \xi}{T_2 - T_1} = 0,32 \text{ эВ}.$

Задача 10.3.2. Проводимость некоторого полупроводника с донорной примесью в α раз больше, чем проводимость того же полупроводника без примесей при той же температуре. Найти отношение концентраций n_e/n_h электронов и дырок в примесном полупроводнике. Считать, что подвижности электронов и дырок равны и не изменяются при добавлении примеси.

Решение

Согласно закону действующих масс (10.14), произведение $n_e n_h = n_i^2$ зависит только от температуры, поэтому оно одинаково для обоих полупроводников. Считая, что подвижности электронов и дырок равны ($b_e = b_h \equiv b$) и не изменяются при добавлении примеси, получим следующие выражения для проводимостей чистого и примесного полупроводников:

$$\begin{aligned}\sigma_{\text{чист}} &= |q_e| (b_e n_e + b_h n_h) = 2|q_e| b n_i, \\ \sigma_{\text{примесн}} &= |q_e| (b_e n_e + b_h n_h) = |q_e| b (n_e + n_h),\end{aligned}$$

По условию задачи:

$$\alpha = \frac{\sigma_{\text{примесн}}}{\sigma_{\text{чист}}} = \frac{n_e + n_h}{2n_i} = \frac{1}{2} \left(\sqrt{\frac{n_e}{n_h}} + \sqrt{\frac{n_h}{n_e}} \right). \quad (10.56)$$

Обозначая $\sqrt{n_e/n_h} \equiv x$, получим из (10.56) квадратное уравнение:

$$x^2 - 2\alpha x + 1 = 0. \quad (10.57)$$

Из двух решений $x_{1,2} = \alpha \pm \sqrt{\alpha^2 - 1}$ уравнения (10.57) выбираем решение со знаком «+», поскольку при добавлении донорной примеси концентрация электронов увеличивается. Окончательно получим:

$$\frac{n_e}{n_h} = \left(\alpha + \sqrt{\alpha^2 - 1} \right)^2 = 2\alpha^2 + 2\alpha\sqrt{\alpha^2 - 1} - 1.$$

Если $\alpha \gg 1$, то $n_e/n_h \approx 4\alpha^2$.

$$\text{Ответ: } \frac{n_e}{n_h} = 2\alpha^2 + 2\alpha\sqrt{\alpha^2 - 1} - 1.$$

Задача 10.3.3. В некотором полупроводнике, у которого подвижность электронов проводимости в $\xi = 2$ раза больше подвижности дырок, эффект Холла при некоторой температуре не наблюдается. Найти отношение концентраций n_e/n_h электронов и дырок при этой температуре.

Решение

В задаче 10.2.5 было получено выражение (10.45) для коэффициента Холла при различных концентрациях электронов и дырок:

$$R_H = \frac{n_h b_h^2 - n_e b_e^2}{|q_e| (n_e b_e + n_h b_h)^2}.$$

Согласно условию задачи, эффект Холла не наблюдается, т.е. $R_H = 0$. Это может быть только при условии $n_h b_h^2 = n_e b_e^2$, откуда

$$\frac{n_e}{n_h} = \frac{b_h^2}{b_e^2} = \frac{1}{\xi^2} = \frac{1}{4}.$$

Ответ: $\frac{n_e}{n_h} = \frac{1}{\xi^2} = \frac{1}{4}.$

Задача 10.3.4. Для некоторого полупроводника n -типа известны концентрация n_e электронов проводимости и проводимость σ . Оценить минимальную величину индукции магнитного поля B_{\min} , необходимую для проведения эксперимента по циклотронному резонансу.

Решение

Поскольку рассматривается полупроводник n -типа, то можно пренебречь концентрацией дырок по сравнению с концентрацией электронов. Тогда проводимость полупроводника будет равна $\sigma = |q_e| n_e b_e$. Подставляя сюда определение подвижности $b_e = |q_e| \tau_e / m_e$, получим:

$$\sigma = \frac{|q_e|^2 n_e \tau_e}{m_e}.$$

Отсюда

$$\frac{1}{\tau_e} = \frac{|q_e|^2 n_e}{\sigma m_e}.$$

Минимальную величину индукции магнитного поля, необходимую для наблюдения циклотронного резонанса, оценим из соотношения $\omega_c \tau_e \approx 1$, где $\omega_c = |q_e| B_{\min} / m_e$. Получим:

$$B_{\min} = \frac{m_e}{|q_e|} \omega_c \approx \frac{m_e}{|q_e|} \frac{1}{\tau_e} = \frac{m_e}{|q_e|} \frac{|q_e|^2 n_e}{\sigma m_e} = \frac{|q_e| n_e}{\sigma}.$$

Ответ: $B_{\min} \approx \frac{|q_e| n_e}{\sigma}.$

10.4. Задачи для самостоятельного решения

Задача 10.4.1 (6.233 [1]). При низких температурах красная граница фотопроводимости чистого беспримесного германия – $\lambda_k = 1,7$ мкм. Найти температурный коэффициент сопротивления $\alpha = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial T}$ германия при комнатной температуре (ρ – удельное сопротивление).

$$\text{Ответ: } \alpha = -\frac{\pi \hbar c}{kT^2 \lambda_k} = -0,05 \text{ K}^{-1}.$$

Задача 10.4.2 (6.235 [1]). Удельное сопротивление некоторого чистого беспримесного полупроводника при комнатной температуре $\rho = 0,5$ Ом·м. После включения источника света оно уменьшилось до $\rho_1 = 0,4$ Ом·м, а через время $\Delta t = 0,008$ с после выключения источника света удельное сопротивление увеличилось до $\rho_2 = 0,45$ Ом·м. Найти среднее время τ жизни электронов проводимости и дырок.

$$\text{Ответ: } \tau = \frac{\Delta t}{\ln \left[\frac{\rho_2 (\rho - \rho_1)}{\rho_1 (\rho - \rho_2)} \right]} = 0,01 \text{ с}.$$

Задача 10.4.3. Решить задачу 10.2.1 при условии, что полупроводник характеризуется тремя различными эффективными массами электронов $m_{e,1} \neq m_{e,2} \neq m_{e,3}$ и тремя различными эффективными массами дырок $m_{h,1} \neq m_{h,2} \neq m_{h,3}$.

$$\text{Ответ: } n_e = N_e \exp\left(\frac{\mu_e - E_g}{kT}\right), \quad n_h = N_h \exp\left(\frac{-\mu_e}{kT}\right),$$

где

$$N_e = 2\sqrt{m_{e,1}m_{e,2}m_{e,3}} \left(\frac{kT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}, \quad N_h = 2\sqrt{m_{h,1}m_{h,2}m_{h,3}} \left(\frac{kT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2},$$

$$\mu_e = \frac{E_g}{2} + \frac{1}{4}kT \ln\left(\frac{m_{h,1}m_{h,2}m_{h,3}}{m_{e,1}m_{e,2}m_{e,3}}\right).$$

Задача 10.4.4. Найти зависимость от температуры химического потенциала электронов μ_e и концентрации n_h дырок в полупроводнике с акцепторной примесью. При решении задачи считать, что $E_a - \mu_e \gg kT$ и $\mu_e \gg kT$, где E_a – акцепторный энергетический уровень. Концентрация акцепторов равна N_a .

$$\text{Ответ: } \mu_e = \frac{E_a}{2} + \frac{1}{2}kT \ln\left(\frac{N_h}{N_a}\right), \quad n_h = \sqrt{N_h N_a} \exp\left(-\frac{E_a}{2kT}\right),$$

$$\text{где } N_h = 2\left(\frac{m_h kT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}.$$

Задача 10.4.5. Найти равновесные концентрации электронов проводимости n_e в полупроводнике, содержащем как донорную, так и акцепторную примеси. Температура полупроводника T , концентрации донорной и акцепторной примеси равны N_d и N_a . Найти зависимость химического потенциала электронов μ_e от температуры. При решении задачи считать, что $E_g - E_d \ll kT \ll E_g - \mu_e$ и $E_a \ll kT \ll \mu_e$, где E_g – ширина запрещенной зоны полупроводника, а E_d и E_a – донорный и акцепторный энергетический уровни (см. рис. 10.1б). Рассмотреть следующие предельные случаи: а) $|N_d - N_a| \ll n_i$; б) $N_d - N_a \gg n_i$; в) $N_a - N_d \gg n_i$, где n_i – концентрация собственных носителей в чистом полупроводнике.

$$\text{Ответ: а) } n_e = n_i + \frac{N_d - N_a}{2}, \quad \mu_e = \mu_0 + \frac{N_d - N_a}{2n_i} kT;$$

$$\text{б) } n_e = N_d - N_a + \frac{n_i^2}{N_d - N_a}, \quad \mu_e = \mu_0 + kT \ln\left(\frac{N_d - N_a}{n_i}\right);$$

$$\text{в) } n_e = \frac{n_i^2}{N_a - N_d}, \quad \mu_e = \mu_0 - kT \ln\left(\frac{N_a - N_d}{n_i}\right),$$

$$\text{где } \mu_0 = \frac{E_g}{2} + \frac{3}{4}kT \ln\left(\frac{m_h}{m_e}\right).$$

Задача 10.4.6. При условиях, аналогичных задаче 10.2.3, найти точную зависимость химического потенциала μ_e от относительной концентрации донорной примеси N_d/n_i для случая $m_e = m_h$.

$$\text{Ответ: } \mu_e = \frac{E_g}{2} + kT \ln \left[\frac{N_d}{2n_i} + \sqrt{\left(\frac{N_d}{2n_i}\right)^2 + 1} \right].$$

Задача 10.4.7 (6.236 [1]). При измерении эффекта Холла пластинку из полупроводника p -типа шириной $h = 0,01$ м и длиной $l = 0,05$ м поместили в магнитное поле с индукцией $B = 0,5$ Тл. К концам пластинки приложили разность потенциалов $U = 10$ В. При этом холловская разность потенциалов $U_H = 0,05$ В и удельное сопротивление $\rho = 0,025$ Ом·м. Найти концентрацию дырок n_h и их подвижность b_h .

$$\text{Ответ: } n_h = \frac{U}{U_H} \frac{h}{l} \frac{B}{|q_e| \rho} = 5 \cdot 10^{21} \text{ м}^{-3},$$

$$b_h = \frac{U_H}{U} \frac{l}{h} \frac{1}{B} = 0,05 \text{ м}^2/\text{В} \cdot \text{с}.$$

Задача 10.4.8 (6.237 [1]). При измерении эффекта Холла в магнитном поле с индукцией $B = 0,5$ Тл поперечная напряженность электрического поля в чистом беспримесном германии оказалась в $\eta = 10$ раз меньше продольной напряженности электрического поля. Найти разность подвижностей электронов проводимости и дырок в таком полупроводнике.

$$\text{Ответ: } b_h - b_e = (\eta B)^{-1} = 0,2 \text{ м}^2/\text{В} \cdot \text{с}.$$

Задача 10.4.9. Рассмотрим эксперимент по циклотронному резонансу (см. задачу 10.2.6). Пусть в некоторый момент времени $t = 0$ переменное электрическое поле выключается. Найти зависимость средних скоростей электронов $\langle v_{e,x} \rangle(t)$ и $\langle v_{e,y} \rangle(t)$, считая, что значения этих величин в момент $t = 0$ известны.

$$\text{Ответ: } \langle v_{e,x} \rangle(t) = \langle v_{e,x} \rangle(0) \cdot \cos(\omega_c t) \exp\left(-\frac{t}{\tau_e}\right),$$

$$\langle v_{e,y} \rangle(t) = \langle v_{e,y} \rangle(0) \cdot \sin(\omega_c t) \exp\left(-\frac{t}{\tau_e}\right), \quad \text{где } \omega_c -$$

циклотронная частота; τ_e – время свободного пробега электрона.

Список литературы

1. *Иродов И.Е.* Задачи по общей физике. Учеб. пособие. – 2-е изд. перераб. М. Наука, 1988.- 416 с.

ГЛАВА 11 ИЗЛУЧЕНИЕ СВЕТА

11.1. Теоретический материал

1. Дипольное приближение. При изучении взаимодействия атома с плоской электромагнитной волной ограничимся *дипольным приближением*, в рамках которого, *во-первых*, пренебрегают магнитным взаимодействием электрона с электромагнитной волной по сравнению с электрическим взаимодействием. *Во-вторых*, если длина волны много больше размера атома, можно считать, что напряженность электрического поля в области пространства, где находится атом, однородна и зависит только от времени. Итак, будем рассматривать атом в электрическом поле $\mathbf{E} = E_0 \cos(\omega t)$. В этом случае взаимодействие атома с электромагнитным полем характеризуется его дипольным моментом \mathbf{d} .

С классической точки зрения, мощность излучения диполя равна

$$P(t) = \frac{\dot{d}^2}{6\pi\epsilon_0 c^3}. \quad (11.1)$$

Используя формулу (11.1), можно оценить время спонтанного излучения атома.

2. Коэффициенты Эйнштейна. Вероятности переходов атома *в единицу времени* между уровнем с энергией E_1 и более высоким уровнем E_2 для спонтанного и вынужденного излучения и поглощения равны соответственно

$$P_{21}^{\text{сп}} = A_{21}, \quad P_{21}^{\text{вын}} = B_{21}\rho_\omega, \quad P_{21}^{\text{погл}} = B_{12}\rho_\omega, \quad (11.2)$$

где A_{21} , B_{21} , B_{12} – коэффициенты Эйнштейна, ρ_ω – спектральная плотность излучения, $\hbar\omega = E_2 - E_1$ – частота излучаемого фотона. В состоянии термодинамического равновесия *населенность* уровней (т.е. число атомов N_1 и N_2 в состояниях с энергиями E_1 и E_2 соответственно) определяется каноническим распределением Гиббса:

$$\frac{N_2}{N_1} = \frac{g_2}{g_1} \exp\left(-\frac{E_2 - E_1}{kT}\right),$$

где g_1 и g_2 – кратности вырождения соответствующих уровней. Считая, что атомы находятся в равновесии с излучением, можно получить простые соотношения между коэффициентами Эйнштейна:

$$g_1 B_{12} = g_2 B_{21}, \quad \frac{A_{21}}{B_{21}} = \frac{\hbar \omega^3}{\pi^2 c^3}.$$

3. Усиление интенсивности света в лазерах. При прохождении плоской электромагнитной волны через однородную изотропную среду интенсивность волны экспоненциально убывает согласно закону Бугера:

$$I(z) = I_0 e^{-\alpha z}, \quad \text{где} \quad \alpha = \frac{\hbar \omega_0}{c \Delta \omega} (n_1 B_{12} - n_2 B_{21}),$$

где n_1 и n_2 – концентрации атомов в основном и возбужденном состояниях. При термодинамическом равновесии $n_1 > n_2$, поэтому $\alpha > 0$, и интенсивность плоской электромагнитной волны экспоненциально убывает с расстоянием. В этом случае коэффициент α называется *коэффициентом поглощения* среды. Однако при создании *инверсной населенности* энергетических уровней ($n_2 > n_1$) среда становится *активной* ($\alpha < 0$), и при прохождении электромагнитной волны через такую среду её интенсивность возрастает.

11.2. Задачи с решениями

Задача 11.2.1. Получить формулу Планка для спектральной плотности энергии ρ_ω абсолютно черного тела, рассмотрев термодинамическое равновесие между излучением в полости и стенками полости, состоящей из одинаковых, не взаимодействующих друг с другом атомов.

Решение

Термодинамическое равновесие осуществляется в результате обмена фотонами между излучением и атомами. Согласно *принципу детального равновесия*, обмен фотонами должен уравниваться для каждой моды излучения. Рассмотрим моду с частотой ω и соответствующие ей переходы атомов между уровнями энергии E_1 и $E_2 > E_1$, в результате которых поглощаются или излучаются фотоны с энергией $\hbar\omega = E_2 - E_1$.

Возможны следующие процессы, соответствующие трем типам *излучательных переходов*:

1. *Поглощение* – переход из основного состояния с энергией E_1 в возбужденное состояние с энергией $E_2 > E_1$ под влиянием падающего на атом излучения. Вероятность такого перехода за время dt равна

$$dP_{12}^{\text{погл}} = -\frac{dN_1}{N_1} = B_{12}\rho_\omega dt. \quad (11.3)$$

Здесь и в дальнейшем $dN_i \leq 0$ – изменение числа атомов на уровне E_i , остальные обозначения такие же, как в (11.2).

2. *Спонтанное излучение* – переход из возбужденного в основное состояние, который происходит независимо от падающего на атом излучения. Вероятность такого перехода за время dt равна

$$dP_{21}^{\text{сп}} = -\frac{dN_2^{\text{сп}}}{N_2} = A_{21}dt. \quad (11.4)$$

3. *Вынужденное излучение* – переход из возбужденного состояния с энергией E_2 в основное состояние с энергией E_1 под влиянием падающего на атом излучения. Вероятность такого перехода за время dt равна

$$dP_{21}^{\text{вын}} = -\frac{dN_2^{\text{вын}}}{N_2} = B_{21}\rho_\omega dt. \quad (11.5)$$

В состоянии термодинамического равновесия число переходов с уровня E_1 на уровень E_2 равно числу обратных переходов с E_2 на E_1 , т.е.

$$dN_1 = dN_2^{\text{сп}} + dN_2^{\text{вын}},$$

откуда с учетом (11.3), (11.4) и (11.5) получим:

$$N_1 B_{12} \rho_\omega = N_2 (A_{21} + B_{21} \rho_\omega).$$

Считая, что при термодинамическом равновесии справедливо каноническое распределение Гиббса, получаем:

$$\frac{N_2}{N_1} = \frac{g_2}{g_1} \exp\left(-\frac{E_2 - E_1}{kT}\right) = \frac{B_{12}\rho_\omega}{A_{21} + B_{21}\rho_\omega}, \quad (11.6)$$

где g_1 и g_2 – кратности вырождения соответствующих уровней.

При $T \rightarrow \infty$, $\rho_\omega \rightarrow \infty$, и из (11.6) следует, что

$$g_1 B_{12} = g_2 B_{21}. \quad (11.7)$$

Если кратности вырождения уровней одинаковы ($g_1 = g_2$), то соотношение (11.7) принимает простой вид:

$$B_{12} = B_{21}. \quad (11.8)$$

Обозначая $B_{12} = B_{21} \equiv B$ и $A_{12} = A$, выразим из (11.6) спектральную плотность энергии излучения:

$$\rho_\omega = \frac{A}{B \left(e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1 \right)}. \quad (11.9)$$

Отношение A/B можно найти, если учесть, что выражение (11.9) при малых частотах ($\hbar\omega \ll kT$) должно совпадать с формулой Рэлея–Джинса: $\rho_\omega = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} kT$ (см. **Главу 1**). Разложив в

выражении (11.9) экспоненту в ряд Тейлора $e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} \approx 1 + \frac{\hbar\omega}{kT} + \dots$, получим:

$$\frac{A}{B} = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \quad (11.10)$$

Подставляя (11.10) в (11.9), получаем формулу Планка:

$$\rho_\omega = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}.$$

Замечания.

1. Испущенные в результате спонтанных переходов фотоны имеют случайные направление распространения, поляризацию и фазу. Вынужденное излучение, обусловленное резонансным взаимодействием квантовой системы с внешним электромагнитным полем, *когерентно* вынуждающему излучению, т.е. имеет такое же направление, частоту, поляризацию и фазу. Простое объяснение этого факта с точки зрения квантовой механики приведено в **задаче 11.2.2**.

2. Кроме излучательных квантовых переходов, возможны *безызлучательные* переходы, при которых квантовая система отдает или получает энергию при взаимодействии с другими системами. Например, атомы или молекулы газа могут получать

или терять энергию при столкновениях друг с другом, или со стенками сосуда. Если возможны как излучательные, так и безизлучательные переходы, то полная вероятность перехода равна сумме вероятностей переходов обоих типов.

Задача 11.2.2. Рассмотрим систему, состоящую из атома и n когерентных фотонов. Найти вероятности поглощения одного из фотонов $P(n \rightarrow n-1)$ и излучения когерентного фотона $P(n \rightarrow n+1)$, если известно, что амплитуда вероятности излучения фотона атомом в отсутствие других фотонов равна a .

Решение

Рассмотрим сначала следующую простую задачу теории вероятностей. Пусть имеется n классических (т.е. нетождественных) частиц и k детекторов. Вероятность попадания любой частицы в i -й детектор равна p_i , причем $\sum_{i=1}^k p_i = 1$ (частица обязательно попадает в один из детекторов). Вопрос: чему равна вероятность того, что n_1 частиц попадут в первый детектор, n_2 – во второй и т.д.? Ответ дается полиномиальным распределением:

$$P^{\text{кл}}(n) = \frac{n!}{n_1! n_2! \dots n_k!} p_1^{n_1} p_2^{n_2} \dots p_k^{n_k}. \quad (11.11)$$

Напомним, как получается выражение (11.11). Вероятность того, что j -я частица попадет в i -й детектор, обозначим $p_i^{(j)}$. Поскольку все частицы находятся в одинаковых начальных условиях, эта вероятность не зависит от номера частицы, т.е. $p_i^{(j)} = p_i$, $j=1, \dots, n$. Используя эти обозначения, вероятность, например, того, что первая частица попадет в первый детектор, а вторая – в третий, можно записать в виде $p_1^{(1)} p_3^{(2)} = p_1 p_3$. Тогда искомая вероятность $P^{\text{кл}}(n)$ будет равна

$$P^{\text{кл}}(n) = \frac{1}{n_1! n_2! \dots n_k!} \cdot \sum_{\text{перест.}} \underbrace{p_1^{(j_1)} \dots p_1^{(j_{n_1})}}_{n_1} \underbrace{p_2^{(j_{n_1+1})} \dots p_2^{(j_{n_1+n_2})}}_{n_2} \dots \underbrace{p_k^{(j_{n-n_k+1})} \dots p_k^{(j_n)}}_{n_k}, \quad (11.12)$$

где индексы j_m принимают одно из значений индекса $j=1, \dots, n$, а сумма берется по всем возможным его перестановкам. Множители $1/(n_i!)$ учитывают возможность перестановки n_i частиц внутри i -го детектора. В силу условия $p_i^{(j)} = p_i$, входящая выражение (11.12) сумма по перестановкам равна $n! p_1^{n_1} p_2^{n_2} \dots p_k^{n_k}$, и мы приходим к полиномиальному распределению (11.11). В частности, вероятность того, что все частицы окажутся в одном детекторе, равна

$$P_1^{\text{кл}}(n) = p^n,$$

где p – вероятность попадания в этот детектор одной частицы. Аналогичный результат получается и для квантовых нетождественных частиц, с той лишь разницей, что вероятность p можно записать в виде $|a|^2$, где a – амплитуда вероятности попадания частицы в детектор.

Решим теперь ту же задачу, считая частицы тождественными бозонами. В этом случае нужно суммировать не вероятности, а амплитуды вероятностей. Тогда вместо (11.12) получим:

$$P^{\text{бозе}}(n) = \frac{1}{n_1! n_2! \dots n_k!} \times \left| \sum_{\text{перест.}} \underbrace{a_1^{(j_1)} \dots a_1^{(j_{n_1})}}_{n_1} \underbrace{a_2^{(j_{n_1+1})} \dots a_2^{(j_{n_1+n_2})}}_{n_2} \dots \underbrace{a_k^{(j_{n-n_k+1})} \dots a_k^{(j_n)}}_{n_k} \right|^2,$$

где $a_i^{(j)}$ – амплитуда вероятности попадания j -й частицы в i -й детектор. Тогда вероятность того, что все бозе-частицы попадут в один детектор, равна

$$P_1^{\text{бозе}}(n) = \frac{1}{n!} \left| \sum_{\text{перест.}} \underbrace{a^{(j_1)} \dots a^{(j_n)}}_n \right|^2 = \frac{1}{n!} |n! a^n|^2 = n! |a|^{2n} = n! p^n = n! P_1^{\text{кл}}(n).$$

В приведенных выше рассуждениях детектор был нужен только для наглядности. Поэтому полученный результат можно сформулировать следующим образом: *вероятность того, что n тождественных бозонов окажутся в одном квантовом состоянии в $n!$ раз больше, чем аналогичная вероятность для нетождественных частиц.*

Пусть атом в присутствии n когерентных фотонов излучает ещё один такой же фотон. Тогда после излучения в системе будет $(n+1)$ тождественных фотонов. Вероятность такого события можно записать в виде:

$$P_1^{\text{бозе}}(n+1) = (n+1)! |a|^{2(n+1)} = (n+1) |a|^2 P_1^{\text{бозе}}(n). \quad (11.13)$$

С другой стороны,

$$P_1^{\text{бозе}}(n+1) = P(n \rightarrow n+1) P_1^{\text{бозе}}(n), \quad (11.14)$$

где $P(n \rightarrow n+1)$ – вероятность излучения $(n+1)$ -го фотона. Сравнивая (11.13) и (11.14), находим:

$$P(n \rightarrow n+1) = (n+1) |a|^2.$$

Вероятность $P(n \rightarrow n+1)$ можно обычным образом записать через амплитуду вероятности излучения: $P(n \rightarrow n+1) = |\langle n+1 | n \rangle|^2$. Отсюда амплитуда вероятности излучения фотона равна

$$\langle n+1 | n \rangle = a \sqrt{n+1}. \quad (11.15)$$

Комплексно сопрягая (11.15), получим:

$$\langle n+1 | n \rangle^* = \langle n | n+1 \rangle = a^* \sqrt{n+1}. \quad (11.16)$$

Если в (11.16) сделать замену $n \rightarrow n-1$, то получим амплитуду вероятности поглощения фотона:

$$\langle n-1 | n \rangle = a^* \sqrt{n}.$$

В этом случае вероятность поглощения фотона равна

$$P(n \rightarrow n-1) = n |a|^2.$$

Замечания.

1. Поскольку $|a|^2$ – это вероятность излучения атома при условии отсутствия других фотонов, то это не что иное, как вероятность спонтанного излучения фотона атомом. Тогда вероятность вынужденного излучения равна $P(n \rightarrow n+1) - |a|^2 = n |a|^2$, т.е. вероятности поглощения фотона. Таким образом, из принципа неразличимости тождественных частиц получается такой

же результат, что и из термодинамических соображений (см. задачу 11.2.1).

2. Допустим, что в условиях рассматриваемой задачи излучился *некогерентный* фотон (имеющий другую частоту, поляризацию, направление или фазу). Поскольку его можно отличить от других имеющихся в системе фотонов, то он не является тождественным им, и вероятность его излучения будет описываться классической формулой, т.е. равна $|a|^2$. Считая, что амплитуда вероятности a не зависит от свойств фотона, приходим к тому, что вероятность излучения когерентного фотона в $(n+1)$ раз больше, чем некогерентного. Поэтому излучение лазера является в высокой степени когерентным.

Ответ: $P(n \rightarrow n+1) = (n+1)|a|^2$, $P(n \rightarrow n-1) = n|a|^2$.

Задача 11.2.3. Оценить отношение вероятностей спонтанного и вынужденного излучения при комнатной температуре в а) ультрафиолетовой области электромагнитного спектра (длина волны $\lambda = 100$ нм); б) видимой области ($\lambda = 500$ нм); в) радиодиапазоне ($\lambda = 1$ м). Сравнить полученные значения с отношением коэффициентов Эйнштейна A/B для соответствующих областей.

Решение

Из соотношений (11.4) и (11.5) следует, что отношение вероятностей спонтанного и вынужденного излучения равно

$$\frac{dP_{21}^{\text{сп}}}{dP_{21}^{\text{вын}}} = \frac{A}{B\rho_\omega}.$$

Используя соотношение (11.9), получаем:

$$\frac{dP_{21}^{\text{сп}}}{dP_{21}^{\text{вын}}} = \exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1 = \exp\left(\frac{2\pi\hbar c}{\lambda kT}\right) - 1. \quad (11.17)$$

Отношение коэффициентов Эйнштейна можно найти из (11.10):

$$\frac{A}{B} = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} = \frac{8\pi\hbar}{\lambda^3} \quad (11.18)$$

Вычисления по формулам (11.17) и (11.18) при $T = 300$ К дают:

$$а) \frac{dP_{21}^{\text{сп}}}{dP_{21}^{\text{вын}}} = 1,9 \cdot 10^{208}; \quad \frac{A}{B} = 2,7 \cdot 10^{-12} \frac{\text{Дж} \cdot \text{с}}{\text{м}^3};$$

$$\text{б)} \frac{dP_{21}^{\text{СП}}}{dP_{21}^{\text{ВЫН}}} = 4,5 \cdot 10^{41}; \quad \frac{A}{B} = 2,1 \cdot 10^{-14} \frac{\text{Дж} \cdot \text{с}}{\text{М}^3};$$

$$\text{в)} \frac{dP_{21}^{\text{СП}}}{dP_{21}^{\text{ВЫН}}} = 4,8 \cdot 10^{-5}; \quad \frac{A}{B} = 2,7 \cdot 10^{-33} \frac{\text{Дж} \cdot \text{с}}{\text{М}^3};$$

Замечание. Из формулы (11.17) и полученных оценок видно, что при *термодинамическом равновесии* вероятность вынужденных переходов значительно меньше вероятности спонтанных переходов при высоких частотах $\hbar\omega \gg kT$; вероятности становятся сравнимыми при частотах $\hbar\omega \approx kT$; а при низких частотах $\hbar\omega \ll kT$ преобладает вынужденное излучение. Это связано с резкой зависимостью спектральной плотности энергии ρ_ω излучения от частоты.

$$\text{Ответ: а)} \frac{dP_{21}^{\text{СП}}}{dP_{21}^{\text{ВЫН}}} = 1,9 \cdot 10^{208}; \quad \frac{A}{B} = 2,7 \cdot 10^{-12} \frac{\text{Дж} \cdot \text{с}}{\text{М}^3};$$

$$\text{б)} \frac{dP_{21}^{\text{СП}}}{dP_{21}^{\text{ВЫН}}} = 4,5 \cdot 10^{41}; \quad \frac{A}{B} = 2,1 \cdot 10^{-14} \frac{\text{Дж} \cdot \text{с}}{\text{М}^3};$$

$$\text{в)} \frac{dP_{21}^{\text{СП}}}{dP_{21}^{\text{ВЫН}}} = 4,8 \cdot 10^{-5}; \quad \frac{A}{B} = 2,7 \cdot 10^{-33} \frac{\text{Дж} \cdot \text{с}}{\text{М}^3}.$$

Задача 11.2.4. Оценить коэффициент спонтанного излучения A_{21} для головных линий серий а) Лаймана и б) Бальмера атома водорода, используя классическую формулу для мощности излучения осциллятора.

Решение

Пусть ядро атома водорода находится в начале координат, тогда дипольный момент атома водорода $\mathbf{d} = q_e \mathbf{r}$, где \mathbf{r} – радиус-вектор электрона. Согласно классической формуле (11.1) для мощности излучения частицы:

$$P = \frac{q_e^2}{6\pi\epsilon_0 c^3} \ddot{r}^2 = \frac{q_e^2 \omega^4 r^2}{6\pi\epsilon_0 c^3}.$$

Эта формула получена в предположении, что электрон в атоме совершает гармонические колебания $r(t) = r_0 \cos(\omega t)$, где r_0 – амплитуда колебаний. Усредняя мощность излучения по времени, получим:

$$\langle P \rangle = \frac{q_e^2 \omega^4}{6\pi\epsilon_0 c^3} \langle r^2 \rangle = \frac{q_e^2 \omega^4 r_0^2}{12\pi\epsilon_0 c^3}.$$

Если среднюю мощность излучения разделить на энергию фотона $\hbar\omega$, то получим число спонтанных переходов в единицу времени, т.е. коэффициент A_{21}

$$A_{21} = \frac{q_e^2 \omega^3 r_0^2}{12\pi\epsilon_0 \hbar c^3} = \frac{2\pi^2 q_e^2 r_0^2}{3\epsilon_0 \hbar \lambda^3}.$$

Считая, что амплитуда колебаний электрона по порядку величины равна размеру атома $r_0 \approx 10^{-10}$ м, для головных линий серии Лаймана ($\lambda = 121,6$ нм) и Бальмера ($\lambda = 656,5$ нм) (см. **задачу 4.2.9**) получаем следующие оценки коэффициента спонтанного излучения

$$а) A_{21} = \frac{2\pi^2 q_e^2 r_0^2}{3\epsilon_0 \hbar \lambda^3} \approx 1 \cdot 10^9 \text{ с}^{-1}, \quad б) A_{21} = \frac{2\pi^2 q_e^2 r_0^2}{3\epsilon_0 \hbar \lambda^3} \approx 6 \cdot 10^6 \text{ с}^{-1}.$$

$$\text{Ответ: } A_{21} = \frac{2\pi^2 q_e^2 r_0^2}{3\epsilon_0 \hbar \lambda^3}, \quad а) A_{21} \approx 1 \cdot 10^9 \text{ с}^{-1}, \quad б) A_{21} \approx 6 \cdot 10^6 \text{ с}^{-1}.$$

Задача 11.2.5. Рассматривая вынужденное излучение атома в поле плоской электромагнитной волны, найти коэффициент Эйнштейна B_{21} . При решении задачи считать, что излучение фотона происходит при переходе атома из возбужденного состояния с энергией E_2 в основное состояние с энергией $E_1 < E_2$. Матричный элемент \mathbf{d}_{21} дипольного электрического момента атома считать известным.

Решение

Ограничимся дипольным приближением, т.е. будем рассматривать атом в электрическом поле $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \cos(\omega t)$. Для определенности будем считать, что волна линейно поляризована и $\mathbf{E}_0 = E_0 \mathbf{e}_x$. В этом случае взаимодействие атома с электромагнитной волной описывается оператором

$$\hat{V} = -(\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}) = -d_x E_0 \cos(\omega t) = V^{(+)} e^{i\omega t} + V^{(-)} e^{-i\omega t}, \quad (11.19)$$

где \mathbf{d} – дипольный электрический момент атома и $V^{(+)} = V^{(-)} = -d_x E_0 / 2$.

Состояние атома не стационарно и описывается волновой функцией $\Psi(q, t)$, где буквой q обозначена совокупность радиус-векторов всех электронов атома. Волновая функция $\Psi(q, t)$ является решением уравнения Шредингера:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = (\hat{H}_0 + \hat{V}(t))\Psi, \quad (11.20)$$

где \hat{H}_0 – гамильтониан атома в отсутствие электромагнитной волны. Будем считать, что стационарные волновые функции

$$\Psi_{0n}(q, t) = \psi_n(q) e^{\frac{i}{\hbar} E_n t},$$

являющиеся решением уравнения

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_0}{\partial t} = \hat{H}_0 \Psi_0, \quad (11.21)$$

известны. Функции $\Psi_{0n}(q, t)$ образуют базис в гильбертовом пространстве, поэтому по ним можно разложить волновую функцию $\Psi(q, t)$:

$$\Psi(q, t) = \sum_n C_n(t) \Psi_{0n}(q, t) = \sum_n C_n(t) \psi_n(q) e^{\frac{i}{\hbar} E_n t}, \quad (11.22)$$

где $C_n(t)$ – амплитуды вероятности обнаружить атом в одном из стационарных состояний. Подставляя (11.22) в уравнение (11.20), получим:

$$i\hbar \sum_n \frac{dC_n(t)}{dt} \psi_n(q) e^{\frac{i}{\hbar} E_n t} = \sum_n C_n(t) \hat{V}(t) \psi_n(q) e^{\frac{i}{\hbar} E_n t}. \quad (11.23)$$

Умножим уравнение (11.23) слева на $\left(\psi_f(q) e^{\frac{i}{\hbar} E_f t} \right)^*$ и проинтегрируем по совокупности координат q . Учитывая свойство ортонормированности волновых функций стационарных состояний $\int \psi_f^* \psi_n dq = \delta_{fn}$ и определение матричного элемента $V_{fn}(t) = \int \psi_f^* \hat{V}(t) \psi_n dq$, получим уравнение:

$$i\hbar \frac{dC_f(t)}{dt} = \sum_n C_n(t) V_{fn}(t) e^{\frac{i}{\hbar} (E_f - E_n) t}. \quad (11.24)$$

Индекс f пробегает все возможные значения n (а их в случае атома бесконечно много), и мы получаем систему линейных дифференциальных уравнений относительно амплитуд вероятности $C_n(t)$, полностью эквивалентную исходному уравнению Шредингера (11.20). Систему уравнений (11.24) можно решить приближенно, сделав разумные предположения о поведении коэффициентов $C_n(t)$.

По условию задачи, в начальный момент времени атом находится в возбужденном состоянии с энергией E_2 . Это означает, что надо решать систему уравнений (24) с начальными условиями $C_2(0) = 1$, $C_1(0) = C_3(0) = C_4(0) = \dots = 0$. В результате взаимодействия с электромагнитной волной атом переходит в основное состояние с энергией E_1 , т.е. амплитуда вероятности C_1 по абсолютной величине должна расти со временем, а C_2 – убывать. Если рассмотреть промежуток времени T , много меньший, чем время перехода атома в основное состояние, то будет выполняться соотношение $|C_1(T)| \ll |C_2(T)| \approx 1$. В этом приближении из (11.24) получим простое уравнение:

$$i\hbar \frac{dC_1(t)}{dt} = V_{12}(t) e^{\frac{i}{\hbar}(E_1 - E_2)t}. \quad (11.25)$$

Вводя обозначения $\omega_{21} = (E_2 - E_1)/\hbar > 0$ и $V_{fn}^{(\pm)}(t) = \int \psi_f^* V^{(\pm)} \psi_n dq$, перепишем уравнение (11.25) в виде:

$$i\hbar \frac{dC_1(t)}{dt} = V_{12}^{(+)} e^{i(\omega - \omega_{21})t} + V_{12}^{(-)} e^{-i(\omega + \omega_{21})t}. \quad (11.26)$$

Поскольку в левой части уравнения (11.26) стоит величина, медленно меняющаяся со временем, то в правой части тоже должна стоять медленно меняющаяся величина. Это возможно только в том случае, когда $\omega \approx \omega_{21}$, поскольку $\omega > 0$ и $\omega_{21} > 0$. При этом второе слагаемое в правой части (11.26) быстро осциллирует и при интегрировании по t дает нуль. Теперь из (11.26) можно получить следующее выражение для $C_1(T)$:

$$C_1(T) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^T V_{12}^{(+)} e^{i(\omega - \omega_{21})t} dt = -\frac{V_{12}^{(+)}}{\hbar(\omega - \omega_{21})} \left[e^{i(\omega - \omega_{21})T} - 1 \right].$$

Для вероятности перехода атома в основное состояние за время T получим:

$$P(2 \rightarrow 1) = |C_1(T)|^2 = \frac{|V_{12}^{(+)}|^2 T^2 \sin^2[(\omega - \omega_{21})T/2]}{\hbar^2 [(\omega - \omega_{21})T/2]^2},$$

а частота переходов, т.е. вероятность перехода в единицу времени, равна, соответственно

$$\gamma(\omega) = \frac{P(2 \rightarrow 1)}{T} = \frac{|V_{12}^{(+)}|^2 T \sin^2[(\omega - \omega_{21})T/2]}{\hbar^2 [(\omega - \omega_{21})T/2]^2}. \quad (11.27)$$

Можно показать, что при $T \rightarrow \infty$ величина $\gamma(\omega)$ не зависит от времени T и отлична от нуля только при частоте $\omega \approx \omega_{21}$. Предел $T \rightarrow \infty$ означает, что $T \gg 1/\omega_{21}$, однако время T по-прежнему остается много меньше времени спонтанного излучения τ .

Выразим $|V_{12}^{(+)}|^2$ через матричный элемент дипольного момента атома:

$$|V_{12}^{(+)}|^2 = \frac{|(d_x)_{12}|^2 E_0^2}{4} = \frac{|\mathbf{d}_{12}|^2 E_0^2}{12}.$$

Мы воспользовались сферической симметрией атома, из которой следует, что $|(d_x)_{12}|^2 = |(d_y)_{12}|^2 = |(d_z)_{12}|^2 = |\mathbf{d}_{12}|^2/3$. Амплитуду напряженности E_0 можно выразить через объемную плотность энергии плоской электромагнитной волны $\rho = \epsilon_0 E_0^2/2$. Тогда

$$|V_{12}^{(+)}|^2 = \frac{\rho |\mathbf{d}_{12}|^2}{6\epsilon_0}. \quad (11.28)$$

Выше предполагалось, что электромагнитная волна является монохроматической. От этого упрощения можно отказаться, если ввести спектральную плотность энергии ρ_ω (см. **Главу 1**):

$\rho = \int_0^\infty \rho_\omega d\omega$. Тогда с учетом (11.27) и (11.28) полная частота переходов в основное состояние равна

$$\gamma = \int_0^\infty \gamma(\omega) d\omega = \frac{T}{\hbar^2} \frac{|\mathbf{d}_{12}|^2}{6\epsilon_0} \int_0^\infty \rho_\omega \frac{\sin^2[(\omega - \omega_{21})T/2]}{[(\omega - \omega_{21})T/2]^2} d\omega. \quad (11.29)$$

Интеграл в (11.29) можно вычислить приближенно, поскольку стоящая под интегралом функция отлична от нуля в узкой области вблизи частоты $\omega \approx \omega_{21}$. Делая замену переменных $x \equiv \frac{1}{2}(\omega - \omega_{21})T$, получим:

$$\gamma \approx \frac{|\mathbf{d}_{12}|^2}{3\epsilon_0 \hbar^2} \rho_{\omega_{21}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 x}{x^2} dx = \frac{\pi |\mathbf{d}_{12}|^2}{3\epsilon_0 \hbar^2} \rho_{\omega_{21}}. \quad (11.30)$$

С другой стороны, частота вынужденных переходов γ может быть выражена через коэффициент Эйнштейна: $\gamma = B_{21} \rho_{\omega_{21}}$. Поэтому из (11.30) находим выражение для коэффициента Эйнштейна вынужденного излучения:

$$B_{21} = \frac{\pi |\mathbf{d}_{12}|^2}{3\epsilon_0 \hbar^2}.$$

Замечание. В дипольном приближении вероятность вынужденного излучения зависит от значения матричного элемента \mathbf{d}_{12} дипольного момента атома. Если $\mathbf{d}_{12} = 0$, то излучение в дипольном приближении не возможно. Это не означает, что излучение не возможно вообще, однако частота таких переходов оказывается существенно более низкой. В атомной физике такие переходы принято называть *запрещенными*. Вычисление матричного элемента \mathbf{d}_{12} позволяет определить условия, при которых $\mathbf{d}_{12} \neq 0$, эти условия принято называть *правилами отбора*.

Ответ: $B_{21} = \frac{\pi |\mathbf{d}_{12}|^2}{3\epsilon_0 \hbar^2}.$

Задача 11.2.6. Рассмотреть спонтанное излучение фотона атомом при переходе из возбужденного состояния с энергией E_2 в основное состояние с энергией $E_1 < E_2$. При решении задачи считать, что данный переход является единственно возможным. Среднее время жизни атома в возбужденном состоянии $\tau = 1/\Gamma$. Найти плотность вероятности $f(\omega)$ излучения фотона с частотой в интервале $(\omega, \omega + d\omega)$.

Решение

В стационарном состоянии частица может находиться бесконечно долго, поэтому чтобы спонтанное излучение фотона было возможным, необходимо, чтобы возбужденное состояние атома было квазистационарным. На примере задачи 6.2.18 было показано, что энергия квазистационарного состояния должна иметь мнимую часть. Если среднее время жизни атома в возбужденном состоянии равно $\tau = 1/\Gamma$, то следует заменить энергию E_2 на комплексную величину $E_2 - i\hbar\Gamma/2$. Действительно, в этом случае волновая функция квазистационарного состояния будет зависеть от времени:

$$\Psi_2 \sim \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\left(E_2 - i\hbar\frac{\Gamma}{2}\right)t\right] = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}E_2t - \frac{\Gamma}{2}t\right],$$

а плотность вероятности обнаружения атома в возбужденном состоянии будет пропорциональна $\rho_2 = |\Psi_2|^2 \sim e^{-\Gamma t} = e^{-t/\tau}$. Основное состояние атома будем считать стационарным, а его энергию E_1 – вещественной.

Рассмотрим атом в поле электромагнитной волны, которую он излучает. Повторяя рассуждения задачи 11.2.5 и заменяя E_2 на $E_2 - i\hbar\Gamma/2$, приходим к уравнению аналогичному (11.26):

$$i\hbar \frac{dC_1(t)}{dt} = V_{12}(t) e^{\frac{i}{\hbar}\left(E_1 - E_2 + i\hbar\frac{\Gamma}{2}\right)t} \approx V_{12}^{(+)} e^{i(\omega - \omega_{21})t - \Gamma t/2}, \quad (11.31)$$

где $\omega_{21} = (E_2 - E_1)/\hbar > 0$. Нас интересует решение уравнения (11.31) в пределе $T \rightarrow \infty$:

$$C_1(T) = -\frac{V_{12}^{(+)}}{\hbar(\omega - \omega_{21} + i\Gamma/2)} \left[e^{i(\omega - \omega_{21})T - \Gamma T/2} - 1 \right] \rightarrow \frac{V_{12}^{(+)}}{\hbar(\omega - \omega_{21} + i\Gamma/2)}.$$

Будем считать, что волновые функции Ψ_1 и Ψ_2 нормированы таким образом, что вероятность перехода с испусканием фотона с частотой в интервале $(\omega, \omega + d\omega)$ равна

$$dP(\omega) = |C_1(T \rightarrow \infty)|^2 d\omega = \frac{|V_{12}^{(+)}|^2}{\hbar^2} \frac{d\omega}{(\omega - \omega_{21})^2 + (\Gamma/2)^2}. \quad (11.32)$$

В данном случае квадрат матричного элемента $|V_{12}^{(+)}|^2$ находится из условия нормировки $\int_0^\infty dP(\omega) = 1$, справедливого при условии, что переход из состояния с энергией E_2 в состояние с энергией E_1 является единственно возможным. Вычислим нормировочный интеграл:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dP(\omega) &= \frac{|V_{12}^{(+)}|^2}{\hbar^2} \int_0^\infty \frac{d\omega}{(\omega - \omega_{21})^2 + (\Gamma/2)^2} \approx \\ &\approx \frac{|V_{12}^{(+)}|^2}{\hbar^2} \frac{2}{\Gamma} \int_{-\infty}^\infty \frac{dx}{x^2 + 1} = \frac{|V_{12}^{(+)}|^2}{\hbar^2} \frac{2}{\Gamma} \arctg x \Big|_{-\infty}^\infty = \frac{|V_{12}^{(+)}|^2}{\hbar^2} \frac{2\pi}{\Gamma}. \end{aligned} \quad (11.33)$$

При вычислении интеграла в (11.33) была сделана замена переменных $x \equiv 2(\omega - \omega_{21})/\Gamma$ и учтено, что функция под знаком интеграла отлична от нуля в узком интервале частот вблизи $\omega \approx \omega_{21}$. В результате из условия нормировки и (11.33), получаем $|V_{12}^{(+)}|^2 = \frac{\Gamma}{2\pi} \hbar^2$. Подставляя $|V_{12}^{(+)}|^2$ в (11.32), найдем плотность вероятности излучения фотона с частотой в интервале $(\omega, \omega + d\omega)$:

$$f(\omega) = \frac{dP(\omega)}{d\omega} = \frac{\Gamma/2\pi}{(\omega - \omega_{21})^2 + (\Gamma/2)^2}. \quad (11.34)$$

Зависимость (11.34) называется *функцией Лоренца*. Функция $f(\omega)$ достигает максимума при частоте $\omega = \omega_{21}$

$$f(\omega_{21}) = \frac{2}{\pi\Gamma},$$

и быстро спадает при увеличении или уменьшении частоты ω . При $\omega = \omega_{21} \pm \Gamma/2$ значение функция $f(\omega)$ вдвое меньше максимального:

$$f(\omega_{21} \pm \Gamma/2) = \frac{1}{\pi\Gamma} = \frac{f(\omega_{21})}{2}.$$

Таким образом, ширина пика, описываемого функцией (11.34), на половине её высоты равна Γ . В этом смысле величину $\hbar\Gamma$ обычно называют *шириной энергетического уровня*.

Замечание. В отличие от задачи 11.2.5, квадрат матричного элемента $|V_{12}^{(+)}|^2$ не может быть вычислен непосредственно в рамках квантовой механики. Поэтому пришлось находить $|V_{12}^{(+)}|^2$ из условия нормировки плотности вероятности. Однако сам факт наличия оператора взаимодействия \hat{V} в гамильтониане был необходим для того, чтобы излучение атома стало возможным. Более точное и логически последовательное решение задачи об излучении атома можно получить в рамках квантовой электродинамики.

$$\text{Ответ: } f(\omega) = \frac{\Gamma/2\pi}{(\omega - \omega_{21})^2 + (\Gamma/2)^2}.$$

Задача 11.2.7. Найти закон изменения интенсивности плоской электромагнитной волны при её прохождении через однородную изотропную среду, состоящую из двухуровневых атомов. При решении задачи считать, что а) спектральная плотность энергии ρ_ω излучения постоянна и отлична от нуля только в узком интервале частот $(\omega - \Delta\omega/2, \omega + \Delta\omega/2)$, а $\hbar\omega = E_2 - E_1$, где E_1 и E_2 – энергии стационарных состояний двухуровневых атомов; б) кратность вырождения уровней с энергиями E_1 и E_2 одинакова, коэффициент Эйнштейна $B_{12} = B_{21} \equiv B$ известен; в) концентрации атомов, находящихся в состояниях с энергиями E_1 и E_2 , равны n_1 и n_2 соответственно.

Решение

Рассмотрим взаимодействие плоской электромагнитной волны с частотой ω с системой двухуровневых атомов, уровни энергии которых удовлетворяют условию $\hbar\omega = E_2 - E_1$. При распространении плоской волны вдоль оси z (см. рис. 11.1) изменение интенсивности волны равно $I(z + dz) = I(z) + dI$. Интенсивность плоской волны связана с объемной плотностью энергии соотношением $I = c\rho$, где c – скорость света в среде. По

условию задачи, спектральная плотность энергии ρ_ω постоянна и отлична от нуля только в интервале частот $(\omega - \Delta\omega/2, \omega + \Delta\omega/2)$, поэтому $I = c\rho_\omega\Delta\omega$. Изменение мощности излучения на расстоянии dz равно

$$dP = \hbar\omega_0 \left(dN_2 dP_{21}^{\text{вын}} - dN_1 dP_{12}^{\text{погл}} \right),$$

где $dN_1 = n_1 S dz$ и $dN_2 = n_2 S dz$ – числа атомов в слое вещества площадью S и толщиной dz , находящихся в состояниях с энергиями E_1 и E_2 соответственно; n_1 и n_2 – концентрации этих атомов. Используя для $dP_{21}^{\text{вын}}$ и $dP_{12}^{\text{погл}}$ формулы (11.3) и (11.5) и учитывая, что $dP = S dI$, получим:

$$dI = \hbar\omega_0 \rho_\omega (n_2 B_{21} - n_1 B_{12}) dz.$$

Поскольку кратность вырождения уровней с энергиями E_1 и E_2 одинакова, то $B_{12} = B_{21} \equiv B$. Выражая спектральную плотность излучения через его интенсивность, получим:

$$dI = I \frac{\hbar\omega_0}{c\Delta\omega} B (n_2 - n_1) dz. \quad (11.35)$$

Интегрируя уравнение (11.35), находим:

$$I(z) = I_0 e^{-\alpha z}, \quad \text{где } \alpha = \frac{\hbar\omega_0}{c\Delta\omega} B (n_1 - n_2). \quad (11.36)$$

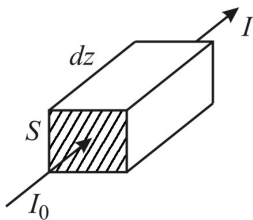


Рис. 11.1. Изменение интенсивности при прохождении электромагнитной волны через вещество.

В состоянии термодинамического равновесия $n_1 > n_2$, поэтому $\alpha > 0$ и интенсивность плоской электромагнитной волны экспоненциально убывает с расстоянием. В этом случае величина α называется *коэффициентом поглощения* среды, а зависимость (11.36) – *законом Бугера*. Однако при создании *инверсной населенности* энергетических уровней ($n_2 > n_1$) среда становится *активной* ($\alpha < 0$), и при прохождении через такую

среду интенсивность электромагнитной волны возрастает. В этом случае величина $|\alpha|$ называется *коэффициентом усиления*.

Ответ: $I(z) = I_0 e^{-\alpha z}$, где $\alpha = \frac{\hbar\omega_0}{c\Delta\omega} B(n_1 - n_2)$.

Задача 11.2.8. Найти коэффициент усиления $|\alpha|$ в центре линии излучения рубинового лазера, имеющего следующие характеристики: разность концентраций атомов $n_2 - n_1 = 5 \cdot 10^{23} \text{ м}^{-3}$; частота, соответствующая центру линии излучения, равна $\nu = 4,326 \cdot 10^{14} \text{ Гц}$; ширина линии $\Delta\nu = 2 \cdot 10^{11} \text{ Гц}$; среднее время спонтанного излучения $\tau = 3 \cdot 10^{-3} \text{ с}$; скорость света в кристалле $c = 1,69 \cdot 10^8 \text{ м/с}$.

Решение

Учитывая соотношение (11.10) для коэффициентов Эйнштейна, получим:

$$B = A \frac{\pi^2 c^3}{\hbar \omega^3} = \frac{1}{\tau} \frac{c^3}{8\pi \hbar \nu^3}.$$

Здесь учтено, что $A = 1/\tau$ и $\omega = 2\pi\nu$. Подставим B в формулу (11.36):

$$|\alpha| = \frac{1}{\tau} \frac{c^2 (n_2 - n_1)}{8\pi \nu^2 \Delta\nu} \approx 5 \text{ м}^{-1}.$$

Таким образом, интенсивность волны в кристалле возрастает примерно на 5%/см.

Ответ: $|\alpha| = \frac{1}{\tau} \frac{c^2 (n_2 - n_1)}{8\pi \nu^2 \Delta\nu} \approx 5 \text{ м}^{-1}$.

Задача 11.2.9. Вычислить среднее время τ жизни атомов в возбужденном состоянии, если интенсивность спектральной линии, обусловленной переходом в основное состояние, убывает в $\eta = 25$ раз на расстоянии $l = 2,5 \text{ мм}$ вдоль пучка атомов, скорость которых $v = 600 \text{ м/с}$.

Решение

Интенсивность линии прямо пропорциональна числу атомов в возбужденном состоянии. Число атомов dN , переходящих из возбужденного состояния в основное за время dt , прямо пропорционально числу атомов N в возбужденном состоянии:

$$dN = -\alpha N dt, \quad (11.37)$$

где $\alpha = \text{const}$. Интегрируя уравнение (11.37), получим:

$$N(t) = N_0 e^{-\alpha t}, \quad (11.38)$$

где N_0 – число атомов в возбужденном состоянии в начальный момент времени. В ядерной физике зависимость (11.38) принято называть *законом радиоактивного распада*.

Среднее время τ жизни атомов в возбужденном состоянии – это время, за которое число атомов в возбужденном состоянии убывает в e раз. Поэтому зависимость (11.38) можно записать в виде:

$$N(t) = N_0 e^{-t/\tau}.$$

Движущейся с постоянной скоростью v атом проходит расстояние l за время $t = l/v$. Таким образом, интенсивность спектральной линии излучения пучка атомов убывает с расстоянием по закону:

$$\frac{I(l)}{I_0} = \frac{N(l)}{N_0} = \exp\left(-\frac{l}{v\tau}\right).$$

По условию задачи, величина $I(l)/I_0$ равна $1/\eta$, откуда

$$\tau = \frac{l}{v \ln \eta} = 1.3 \cdot 10^{-6} \text{ с.}$$

Замечание. Полученная в задаче формула для интенсивности излучения

$$I(l) = I_0 e^{-\text{const} \cdot l} \quad (11.39)$$

формально имеет такой же вид, как и закон Бугера (11.36). Однако физическое содержание формул (11.36) и (11.39) совершенно разное. Выражение (11.39) получено для *спонтанного* излучения атомов, находящихся в возбужденном состоянии, в то время как закон Бугера (11.36) связан с *вынужденным* поглощением и излучением фотонов атомами среды.

Ответ: $\tau = \frac{l}{v \ln \eta} = 1.3 \cdot 10^{-6} \text{ с.}$

11.3. Короткие задачи

Задача 11.3.1. Оцените, при какой температуре будут равны вероятности спонтанного и вынужденного излучения для двухуровневой системы с энергией перехода $E_2 - E_1 = 2,4$ эВ, находящейся в термодинамическом равновесии с излучением?

Решение

Из соотношения (11.17) получаем:

$$\frac{dP_{21}^{\text{сп}}}{dP_{21}^{\text{вын}}} = \exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1 = \exp\left(\frac{E_2 - E_1}{kT}\right) - 1.$$

Отношение вероятностей равно 1, если $\exp\left(\frac{E_2 - E_1}{kT}\right) = 2$, откуда

$$T = \frac{E_2 - E_1}{k \ln 2} \approx 40200 \text{ К}.$$

Ответ: $T = \frac{E_2 - E_1}{k \ln 2} \approx 40200 \text{ К}.$

Задача 11.3.2. Явление электронного парамагнитного резонанса (см. задачу 7.2.7) заключается в резонансном поглощении электромагнитного излучения неспаренными электронами, вследствие чего происходят электронные переходы между подуровнями, обусловленными переворотом спина. Эти эксперименты проводятся в диапазоне сверхвысоких частот. Для электромагнитного излучения частотой $\nu = 30$ ГГц вычислить отношение населенностей атомных подуровней а) при комнатной температуре и б) при 4 К.

Решение

Населенность уровней (число атомов N_1 и N_2 в состояниях с энергией E_1 и $E_2 > E_1$) определяется каноническим распределением Гиббса:

$$\frac{N_2}{N_1} = \exp\left(-\frac{E_2 - E_1}{kT}\right) = \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right). \quad (11.40)$$

Подставляя в (11.40) $\omega = 2\pi\nu$, получим:

$$а) \frac{N_2}{N_1} = 0,995, \quad б) \frac{N_2}{N_1} = 0,7.$$

Ответ: $\frac{N_2}{N_1} = \exp\left(-\frac{h\nu}{kT}\right)$, а) $\frac{N_2}{N_1} = 0,995$, б) $\frac{N_2}{N_1} = 0,7$.

Задача 11.3.3. а) Оценить, какая относительная часть атомов водорода находится в первом возбужденном состоянии при 300 К. б) При какой температуре примерно 1% атомов находится в возбужденном состоянии?

Решение

Считая, что при комнатной температуре атомы водорода могут находиться либо в основном, либо в первом возбужденном состоянии, из соотношения (11.6) получаем:

$$\frac{N_2}{N_1} = \frac{g_2}{g_1} \exp\left(-\frac{E_2 - E_1}{kT}\right).$$

Учитывая, что кратность вырождения n -ого уровня атома водорода равна $g_n = 2n^2$, а его энергия $E_n = -Ry/n^2$, находим:

$$\frac{N_2}{N_1} = 4 \exp\left(-\frac{3Ry}{4kT_k}\right) \approx 1,5 \cdot 10^{-171}.$$

Потребовав, чтобы $N_2/N_1 = 0,01$, получим:

$$T = \frac{3Ry}{4k \ln(400)} \approx 20000 \text{ К}.$$

Замечание. При вычислениях не учитывалась возможность возбуждения атома водорода при столкновениях.

Ответ: а) $\frac{N_2}{N_1} = 4 \exp\left(-\frac{3Ry}{4kT_k}\right) \approx 1,5 \cdot 10^{-171}$;

б) $T = \frac{3Ry}{4k \ln(400)} \approx 20000 \text{ К}.$

Задача 11.3.4. Для некоторого атома коэффициент Эйнштейна равен $B_{21} = 3 \cdot 10^{19} \frac{\text{М}^3}{\text{Вт} \cdot \text{с}^3}$. Найти время жизни атома в возбужденном состоянии, если длина волны излучения равна а) 500 нм (видимый диапазон) и б) 50 нм (УФ-диапазон).

Решение

Вероятность спонтанного перехода связана со временем жизни соотношением $\tau = 1/A_{21}$. Учитывая связь коэффициентов Эйнштейна (11.10), получим:

$$\tau = \frac{1}{A_{21}} = \frac{\pi^2 c^3}{\hbar \omega^3 B_{21}} = \frac{\lambda^3}{8\pi\hbar B_{21}},$$

отсюда

$$a) \tau = 1,6 \cdot 10^{-6} \text{ с}, \quad б) \tau = 1,6 \cdot 10^{-9} \text{ с}.$$

$$\text{Ответ: } \tau = \frac{\lambda^3}{8\pi\hbar B_{21}}, \quad a) \tau = 1,6 \cdot 10^{-6} \text{ с}, \quad б) \tau = 1,6 \cdot 10^{-9} \text{ с}.$$

11.4. Задачи для самостоятельного решения

Задача 11.4.1 (6.133 [1]). Определить отношение числа атомов газообразного натрия в состоянии $3P$ к числу атомов в основном состоянии $3S$ при температуре $T = 2400 \text{ К}$, если переходу $3P \rightarrow 3S$ соответствует спектральная линия с длиной волны $\lambda = 589 \text{ нм}$.

$$\text{Ответ: } \frac{N_2}{N_1} = \frac{g_2}{g_1} \exp\left(-\frac{2\pi\hbar c}{\lambda kT}\right) = 1,14 \cdot 10^{-4}.$$

Задача 11.4.2 (6.138 [1]). Атомарный водород находится в термодинамическом равновесии со своим излучением. Найти:

а) отношение вероятностей индуцированного и спонтанного излучений атомов с уровня $2P$ при температуре $T = 3000 \text{ К}$;

б) температуру T_0 , при которой эти вероятности равны.

$$\text{Ответ: } a) \frac{dP_{21}^{\text{сп}}}{dP_{21}^{\text{вын}}} = \exp\left(\frac{3Ry}{4kT}\right) - 1 \approx 10^{17},$$

$$б) T_0 = \frac{3Ry}{4k \ln 2} = 1,7 \cdot 10^5 \text{ К}.$$

Задача 11.4.3 (6.140 [1]). Длина волны резонансной линии ртути $\lambda = 253,65 \text{ нм}$. Среднее время жизни атомов ртути в состоянии резонансного возбуждения $\tau = 0,15 \text{ мкс}$. Оценить отношение

доплеровского уширения этой линии к ее естественной ширине при температуре газа $T = 300 \text{ К}$.

Ответ:
$$\frac{\Delta\lambda_{\text{доп}}}{\Delta\lambda_{\text{ест}}} \approx \frac{4\pi v\tau}{\lambda} \approx 10^3, \text{ где } v = \sqrt{\frac{2RT}{M}}, \text{ } M \text{ – молярная}$$
 масса.

Задача 11.4.4 (6.137 [1]). Атомарный литий с концентрацией $n = 3,6 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ находится при температуре $T = 1500 \text{ К}$. При этом мощность излучения резонансной линии $2P \rightarrow 2S$ ($\lambda = 671 \text{ нм}$) в расчете на единицу объема газа равна $P = 0,3 \text{ Вт/см}^3$. Найти среднее время жизни τ атомов лития в состоянии резонансного возбуждения.

Ответ:
$$\tau = \frac{n\hbar\omega}{P} \frac{g_2}{g_1} \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right) = 65 \text{ нс}.$$

Задача 11.4.5 (6.139 [1]). Через газ при температуре T проходит пучок света с частотой ω , равной резонансной частоте перехода атомов газа, причем $\hbar\omega \gg kT$. Показать, учитывая индуцированное излучение, что коэффициент поглощения газа равен $\alpha = \alpha_0 \left[1 - \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right) \right]$, где α_0 – коэффициент поглощения при $T \rightarrow 0$.

Задача 11.4.6. Найти условие стационарной генерации лазера, если в отсутствие светового потока коэффициент усиления равен α_0 , длина волны линии излучения λ , добротность резонатора Q .

Ответ: $\alpha_0\lambda/2 = 1/Q$.

Задача 11.4.7. По аналогии с задачей 11.2.5 найти коэффициент Эйнштейна B_{12} . Убедиться в том, что вычисленные таким образом коэффициенты B_{12} и B_{21} равны.

Ответ:
$$B_{12} = \frac{\pi |\mathbf{d}_{21}|^2}{3\varepsilon_0 \hbar^2}.$$

Задача 11.4.8. Покажите, что в дипольном приближении электромагнитные переходы возможны только между состояниями с различной чётностью (правило Лапорта).

Указание. Понятие четности обсуждалось в задаче 6.4.5. Правило Лапорта следует из полученного нами в задаче 11.2.5 результата: переход запрещен, если $\mathbf{d}_{12} = 0$.

Задача 11.4.9. Частица массой m и с зарядом q находится в прямоугольной потенциальной яме $U(x) = \begin{cases} 0, & x \in (0, L) \\ \infty, & x \notin (0, L) \end{cases}$. Вычислить матричный элемент d_{12} оператора дипольного момента $\hat{d} = qx$.

Ответ: $d_{12} = -\frac{16qL}{9\pi^2}$.

Задача 11.4.10. Частица массой m и с зарядом q находится в квадратичной потенциальной яме $U(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$. Вычислить матричный элемент d_{01} оператора дипольного момента $\hat{d} = qx$.

Ответ: $d_{01} = q\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$.

Список литературы

1. *Иродов И.Е.* Задачи по общей физике. Учеб. пособие. – 2-е изд. перераб. М. Наука, 1988.- 416 с.

ГЛАВА 12 НИЗКОРАЗМЕРНЫЕ НАНОСТРУКТУРЫ

12.1. Теоретический материал

1. Низкоразмерные наноструктуры. Если движение электрона ограничено по одному или нескольким направлениям, то плотность состояний электронного газа перестает быть пропорциональной \sqrt{E} . В случае квазидвумерного электронного газа плотность состояний имеет ступенчатый вид:

$$\rho(E) = \frac{m}{\pi\hbar^2} S \sum_{n=1}^{\infty} \theta(E - E_n),$$

где $\theta(x) = \begin{cases} 1, & x \geq 0, \\ 0, & x < 0, \end{cases}$ – единичная ступенчатая функция Хевисайда,

а в случае квазиодномерного электронного газа – представляет собой последовательность резких пиков:

$$\rho(E) = \frac{\sqrt{2m}}{\pi\hbar} L \sum_{n,k} \frac{\theta(E - E_{nk})}{\sqrt{E - E_{nk}}}.$$

Вследствие этого низкоразмерные наноструктуры обладают свойствами, сильно отличающимися от свойств макроскопических образцов.

2. Квантовая проводимость. Исследования низкоразмерных наноструктур (нанопроводов и наноконтактов) показали, что их проводимость $G = I/V$ не может быть сколь угодно большой, и ограничена некоторой максимальной величиной $G_{\max} = G_0 n$, где $n = 1, 2, 3, \dots$ – целое число, а

$$G_0 = \frac{q_e^2}{2\pi\hbar} = (25,8 \text{ кОм})^{-1}$$

– *квант проводимости**. Если электрон проходит через наноструктуру без рассеяния, то говорят о *баллистической* проводимости.

3. Электрон во внешнем магнитном поле. Предположим, что электрон может двигаться только в плоскости xu . Если

* По историческим соображениям квантом проводимости часто называют величину $2G_0$.

перпендикулярно этой плоскости приложено внешнее магнитное поле $\mathbf{V} = V\mathbf{e}_z$, то, согласно классическим представлениям, на электрон будет действовать сила Лоренца, и он будет двигаться по круговой орбите. При этом энергия электрона ϵ может принимать любые значения. С точки зрения квантовой механики, энергия электрона в магнитном поле может принимать только дискретные значения

$$\epsilon_n = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right),$$

называемые *уровнями Ландау*, где $n = 0, 1, 2, \dots$, $\omega_c = |q_e|B/m$ – циклотронная частота. Если речь идет об электронах в кристалле, то m – это *циклотронная масса* (см. **задачу 10.2.6**), которая может не совпадать ни с массой электрона в вакууме m_e , ни с эффективной массой электрона $m_{\text{эфф}}$.

4. Квантовый эффект Холла. Если двумерный нерелятивистский электронный газ находится на прямоугольной пластине размером $L_x \times L_y$, и перпендикулярно к плоскости пластины приложено внешнее магнитное поле $\mathbf{V} = V\mathbf{e}_z$, а вдоль оси x течет электрический ток I , то между краями пластины $y = 0$ и $y = L_y$ появляется разность потенциалов V_H , называемая напряжением Холла. В этом заключается эффект Холла, рассмотренный в **Главе 10**. В двумерном случае удобнее характеризовать величину эффекта Холла с помощью сопротивления Холла $\tilde{R}_H = V_H/I$. С классической точки зрения сопротивление Холла равно

$$\tilde{R}_H = \frac{B}{|q_e|n_{2D}},$$

где n_{2D} – двумерная концентрация электронного газа, т.е. \tilde{R}_H линейно зависит от B . Однако при низких температурах зависимость $\tilde{R}_H(B)$ оказывается ступенчатой, причем на ступенях сопротивление Холла принимает значения

$$\tilde{R}_H = \frac{2\pi\hbar}{q_e^2} \frac{1}{n}, \quad \text{где } n = 1, 2, 3, \dots$$

Этот эффект был открыт в 1980 году и назван *квантовым эффектом Холла*. В 1981 году был открыт *дробный квантовый*

эффект Холла, заключающийся в том, что при еще более низких температурах число n может принимать дробные значения. В 1990 году квант сопротивления $2\pi\hbar/q_e^2$ стал новым международным эталоном сопротивления, а в 1998 году за открытие нового вида квантовой жидкости с дробно заряженными возбуждениями была присуждена Нобелевская премия по физике.

12.2. Задачи с решениями

Задача 12.2.1. Найти плотность состояний $\rho(E)$ нерелятивистского газа невзаимодействующих электронов в тонком слое толщиной Δz . Считать, что потенциальная энергия электрона $U(x, y, z) = 0$, если $z \in [0, \Delta z]$ и $U(x, y, z) = \infty$, если $z \in (-\infty, 0) \cup (\Delta z, \infty)$.

Решение

Поскольку движение электрона ограничено по оси z , для него закон дисперсии имеет вид:

$$E = E_n + \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m}, \quad (12.1)$$

где

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m(\Delta z)^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

– уровни энергии электрона в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками (см. **задачу 6.2.1**). Обозначим импульс электрона в плоскости xu как $p_{\perp} = \sqrt{p_x^2 + p_y^2}$ и перепишем закон дисперсии (12.1) в виде:

$$E = E_n + \frac{p_{\perp}^2}{2m},$$

откуда

$$p_{\perp} = \sqrt{2m(E - E_n)} \quad \text{и} \quad p_{\perp} dp_{\perp} = m dE.$$

Таким образом, интервалу энергий $(E, E + dE)$ соответствует кольцо радиусом p_{\perp} и толщиной dp_{\perp} в двумерном импульсном пространстве. Число квантовых состояний с заданным квантовым числом n в интервале энергий $(E, E + dE)$ равно

$$dn_s = (2s + 1) \frac{2\pi p_{\perp} dp_{\perp}}{(2\pi\hbar)^2/S} \theta(E - E_n) = \frac{m dE}{\pi\hbar^2} S \theta(E - E_n), \quad (12.2)$$

где $2\pi p_{\perp} dp_{\perp}$ – площадь кольца в двумерном импульсном пространстве,

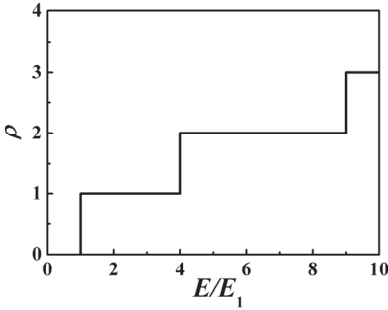


Рис. 12.1. Зависимость плотности состояний квазидвумерного электронного газа от E/E_1 .

$(2\pi\hbar)^2/S$ – объем одного квантового состояния в двумерном импульсном пространстве, S – нормировочная площадь, $(2s + 1) = 2$ – число состояний электрона с различной проекцией спина на ось z , $\theta(E - E_n)$ – функция Хевисайда. Полное число состояний с энергией в интервале $(E, E + dE)$ получим, суммируя (12.2) по квантовому числу n . В результате плотность

состояний электронного газа равна

$$\rho(E) = \frac{m}{\pi\hbar^2} S \sum_{n=1}^{\infty} \theta(E - E_n). \quad (12.3)$$

Таким образом, плотность состояний квазидвумерного электронного газа описывается ступенчатой функцией, изображенной на рис. 12.1 (нормировочная константа S выбрана равной $\pi\hbar^2/m$).

Ответ:
$$\rho(E) = \frac{m}{\pi\hbar^2} S \sum_{n=1}^{\infty} \theta(E - E_n).$$

Задача 12.2.2. Найти плотность состояний $\rho(E)$ нерелятивистского газа невзаимодействующих электронов в тонкой нити толщиной Δz и шириной Δy . Считать, что потенциальная энергия электрона $U(x, y, z) = 0$, если $z \in [0, \Delta z]$ и $y \in [0, \Delta y]$, иначе $U(x, y, z) = \infty$.

Решение

Решение данной задачи аналогично решению задачи 12.2.1. Закон дисперсии для электрона в тонкой нити:

$$E = E_{nk} + \frac{p_x^2}{2m}, \quad (12.4)$$

где

$$E_{nk} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{n^2}{(\Delta z)^2} + \frac{k^2}{(\Delta y)^2} \right), \quad n, k = 1, 2, 3, \dots$$

– уровни энергии электрона в двумерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками.

Из закона дисперсии (12.4) следует, что $p_x = \sqrt{2m(E - E_{nk})}$ и $p_x dp_x = m dE$. В одномерном случае интервалу энергий $(E, E + dE)$ соответствуют два интервала шириной dp_x в импульсном пространстве: $(-p_x - dp_x, -p_x)$ и $(p_x, p_x + dp_x)$. Поэтому число квантовых состояний с заданными квантовыми числами n и k в интервале энергий $(E, E + dE)$ равно

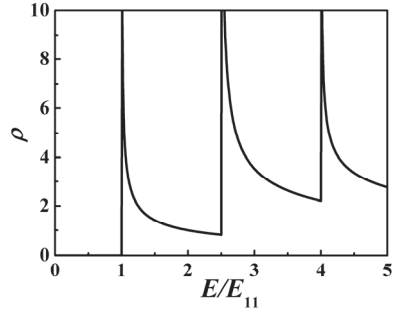


Рис. 12.2. Зависимость плотности состояний квазиодномерного электронного газа от E/E_{11} .

$$dn_s = (2s + 1) \frac{2dp_x}{(2\pi\hbar)/L} \theta(E - E_{nk}) = \frac{\sqrt{2m} dE}{\pi\hbar} L \frac{\theta(E - E_{nk})}{\sqrt{E - E_{nk}}}, \quad (12.5)$$

где $(2\pi\hbar)/L$ – объем одного квантового состояния в одномерном импульсном пространстве, L – нормировочная длина, $(2s + 1) = 2$ – число состояний электрона с различной проекцией спина на ось z , $\theta(E - E_{nk})$ – функция Хевисайда. Полное число состояний с энергией в интервале $(E, E + dE)$ получим, суммируя (12.5) по квантовым числам n и k . В результате плотность состояний электронного газа равна

$$\rho(E) = \frac{\sqrt{2m}}{\pi\hbar} L \sum_{n,k} \frac{\theta(E - E_{nk})}{\sqrt{E - E_{nk}}}. \quad (12.6)$$

Плотность состояний квазиодномерного электронного газа для случая $\Delta z = \Delta y$ изображена на рис. 12.2 (нормировочная константа L выбрана равной $\pi\hbar/\sqrt{2m}$).

$$\text{Ответ: } \rho(E) = \frac{\sqrt{2m}}{\pi\hbar} L \sum_{n,k} \frac{\theta(E - E_{nk})}{\sqrt{E - E_{nk}}}.$$

Задача 12.2.3. Найти максимальную проводимость G_{\max} наноконтакта, имеющего один невырожденный уровень энергии $E_0 \approx \epsilon_F$, где ϵ_F – энергия Ферми электронов в металлических электродах, между которыми находится контакт.

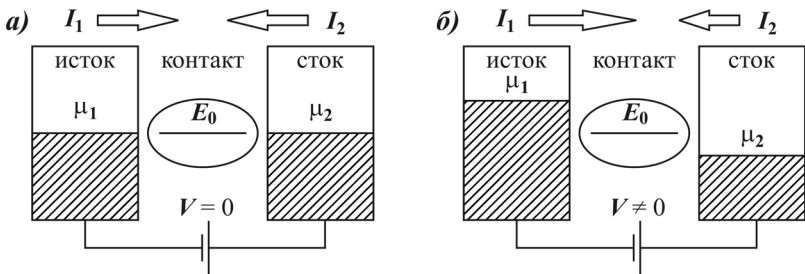


Рис. 12.3. Простейшая модель наноконтакта, находящегося между двумя металлическими электродами: а) разность потенциалов между электродами равна нулю, б) разность потенциалов отлична от нуля.

Решение

При решении данной задачи рассмотрим следующую простую модель наноконтакта, изображенную на рис. 12.3. Слева и справа от контакта находятся два металлических электрода макроскопических размеров, которые будем называть *исток* и *сток*. Будем считать, что электроды сделаны из одного и того же металла и находятся при одинаковой температуре. Тогда при нулевой разности потенциалов $V=0$ между ними их химические потенциалы равны: $\mu_1 = \mu_2 \approx \epsilon_F$. Нанокontakt представляет собой микроскопическую атомную или молекулярную систему с дискретным спектром энергии. Будем считать, что у контакта есть только одно состояние с энергией, близкой к энергии Ферми электронов в электродах $E_0 \approx \epsilon_F$, т.е. этот уровень энергии невырожден, в том числе и по проекции спина электрона на ось z .

Рассмотрим сначала задачу о протекании тока через контакт, пренебрегая уширением уровня энергии E_0 . Средние числа заполнения квантовых состояний с энергией E_0 и определенной проекцией спина s_z в истоке и стоке определяются распределением Ферми–Дирака

$$\bar{n}_1(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - \mu_1}{kT}\right) + 1} \quad \text{и} \quad \bar{n}_2(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - \mu_2}{kT}\right) + 1}.$$

Среднее число электронов в контакте на уровне энергии E_0 обозначим \bar{n} . Частоту переходов электронов между истоком и контактом обозначим γ_1 , а между стоком и контактом – γ_2 . Тогда токи I_1 и I_2 , втекающие в контакт с истока и стока, равны

$$I_1 = q_e \gamma_1 (\bar{n}_1(E_0) - \bar{n}) \quad \text{и} \quad I_2 = q_e \gamma_2 (\bar{n}_2(E_0) - \bar{n}). \quad (12.7)$$

Поскольку электрический заряд в контакте сохраняется, то

$$I_1 = -I_2. \quad (12.8)$$

Подставляя (12.7) в (12.8), найдем среднее число электронов в контакте в состоянии с энергией E_0 :

$$\bar{n} = \frac{\gamma_1 \bar{n}_1(E_0) + \gamma_2 \bar{n}_2(E_0)}{\gamma_1 + \gamma_2}. \quad (12.9)$$

Подставляя (12.9) в (12.7), найдем ток через контакт:

$$I \equiv I_1 = -I_2 = q_e \frac{\gamma_1 \gamma_2}{\gamma_1 + \gamma_2} [\bar{n}_1(E_0) - \bar{n}_2(E_0)]. \quad (12.10)$$

При нулевой разности потенциалов $V = 0$ между истоком и стоком $\bar{n}_1(E_0) = \bar{n}_2(E_0)$, и из формулы (12.10) получаем $I = 0$, как это и должно быть.

Далее рассмотрим случай, когда к электродам подключен источник постоянного напряжения, как это показано на рис. 12.3б. При этом химические потенциалы электронов в истоке и стоке изменяются так, что $\mu_2 - \mu_1 = q_e V$. При $V > 0$ химический потенциал μ_1 увеличивается, а μ_2 – уменьшается, т.к. $q_e < 0$. Энергетический уровень E_0 при этом оказывается между μ_1 и μ_2 .

Будем считать, что температура достаточно мала, и выполняются соотношения: $\mu_1 - E_0 \gg kT$ и $E_0 - \mu_2 \gg kT$. Тогда $\bar{n}_1(E_0) \approx 1$ и $\bar{n}_2(E_0) \approx 0$, и из формулы (12.10) получим:

$$I = q_e \frac{\gamma_1 \gamma_2}{\gamma_1 + \gamma_2} = q_e \gamma,$$

где $\gamma = \gamma_1 \gamma_2 / (\gamma_1 + \gamma_2)$. Проводимость контакта оказывается равной $G = |I|/V = |q_e| \gamma / V$. Мы получили, что проводимость G может быть сколь угодно большой, что противоречит экспериментальным данным.

Для понимания, что мы не учли при решении задачи, перепишем формулу (12.10) в виде:

$$I = q_e \frac{\gamma_1 \gamma_2}{\gamma_1 + \gamma_2} \int_0^{\infty} f(E) [\bar{n}_1(E) - \bar{n}_2(E)] dE, \quad (12.11)$$

где $f(E) = \delta(E - E_0)$ – плотность вероятности обнаружения электрона с энергией E на уровне энергии E_0 при условии, что ширина уровня равна нулю. На самом деле, в результате взаимодействия контакта с электродами уровень энергии E_0 становится нестационарным. У него появляется конечная ширина $\hbar\Gamma$, где $\tau = 1/\Gamma$ – среднее время жизни электрона в состоянии с энергией E_0 (см. задачу 11.2.6). Поскольку электрон из контакта может перейти в исток с частотой γ_1 и в сток с частотой γ_2 , то $\Gamma = \gamma_1 + \gamma_2$. Тогда согласно формуле (11.34) плотность вероятности обнаружить электрон с энергией E на уровне энергии E_0 равна

$$f(E) = \frac{(\gamma_1 + \gamma_2) \hbar / 2\pi}{(E - E_0)^2 + ((\gamma_1 + \gamma_2) \hbar / 2)^2}. \quad (12.12)$$

Подставляя (12.12) в (12.11), получим:

$$I = q_e \gamma_1 \gamma_2 \frac{\hbar}{2\pi} \int_0^{\infty} \frac{\bar{n}_1(E) - \bar{n}_2(E)}{(E - E_0)^2 + ((\gamma_1 + \gamma_2) \hbar / 2)^2} dE. \quad (12.13)$$

При выполнении соотношений $\mu_1 - E_0 \gg kT$ и $E_0 - \mu_2 \gg kT$ разность $\bar{n}_1(E) - \bar{n}_2(E)$ равна 1 при $\mu_1 > E > \mu_2$, и 0 при других

значениях энергии. Поэтому, воспользовавшись теоремой о среднем, можно приближенно вычислить интеграл в выражении (12.13):

$$I \approx \frac{q_e \hbar}{2\pi} \gamma_1 \gamma_2 \int_{\mu_2}^{\mu_1} \frac{dE}{(E - E_0)^2 + ((\gamma_1 + \gamma_2)\hbar/2)^2} \approx \frac{q_e \hbar}{2\pi} \gamma_1 \gamma_2 \frac{\mu_1 - \mu_2}{(E^* - E_0)^2 + ((\gamma_1 + \gamma_2)\hbar/2)^2}, \quad (12.14)$$

где $E^* \in (\mu_2, \mu_1)$, $\mu_2 - \mu_1 = q_e V$. Приравнивая к нулю частные производные $\partial I / \partial E^*$ и $\partial I / \partial \gamma_1$, найдем, что выражение (12.14) достигает своего максимума при $E^* = E_0$ и $\gamma_1 = \gamma_2$:

$$I_{\max} = \frac{q_e \hbar}{2\pi} \gamma_1^2 \frac{\mu_1 - \mu_2}{(\gamma_1 \hbar)^2} = -\frac{q_e^2}{2\pi \hbar} V.$$

Отсюда максимальная проводимость наноконтакта равна

$$G_{\max} = \frac{|I_{\max}|}{V} = \frac{q_e^2}{2\pi \hbar} = (25,8 \text{ кОм})^{-1}. \quad (12.15)$$

Максимальной проводимостью (12.15) обозначается G_0 и называется *квантом проводимости*.

Замечания.

1. Условие $E^* = E_0$ означает, что должно выполняться неравенство $|\mu_1 - \mu_2| = |q_e|V \ll (\gamma_1 + \gamma_2)\hbar$, т.е. ширина уровня существенно превышает величину $|q_e|V$, которая в свою очередь должна быть много больше тепловой энергии электронов kT . Таким образом, максимальная проводимость контакта наблюдается только при низких температурах $kT \ll |q_e|V \ll (\gamma_1 + \gamma_2)\hbar$, обычно составляющих несколько кельвинов.

2. Экспериментально квантовая проводимость впервые наблюдалась, когда уровень энергии E_0 был двукратно вырожден по проекции спина s_z . Максимальная проводимость такого контакта

равна $2G_0$. Поэтому в научной литературе квантом проводимости часто называют величину $2G_0 = q_e^2 / \pi \hbar = (12,9 \text{ кОм})^{-1}$.

$$\text{Ответ: } G_{\max} = \frac{q_e^2}{2\pi\hbar} = (25,8 \text{ кОм})^{-1}.$$

Задача 12.2.4. Найти баллистическую проводимость G_n квантовой нити, если плотность состояний $\rho(E)$ электронов в ней такая же, как у нерелятивистского газа невзаимодействующих электронов.

Решение

В задаче 12.2.2 было получено выражение (12.6) для плотности состояний квазиодномерного нерелятивистского электронного газа. При решении задачи 12.2.2 уровни энергии E_{nk} электрона в двумерной потенциальной яме нумеровались двумя индексами $n, k = 1, 2, 3, \dots$. Перенумеруем их по возрастанию $E_1 < E_2 < E_3 < \dots \sqrt{b^2 - 4ac}$ с помощью одного индекса $i = 1, 2, 3, \dots$. Будем считать, что каждой энергии E_i соответствует только одна пара индексов $\{n, k\}$. Тогда формулу (12.6) можно написать в виде:

$$\rho(E) = \frac{\sqrt{2m}}{\pi\hbar} L \sum_i \frac{\theta(E - E_i)}{\sqrt{E - E_i}}. \quad (12.16)$$

Будем считать, что плотность состояний электронов в квантовой нити описывается формулой (12.16). При низкой температуре ($T \approx 0 \text{ К}$) плотность вероятности обнаружить электрон с энергией в интервале $(E, E + dE)$ равна:

$$f(E) = \frac{\rho(E)\bar{n}(E)}{N} = \frac{\sqrt{2m}}{\pi\hbar} \frac{1}{n_{1D}} \sum_i \frac{\theta(E - E_i)}{\sqrt{E - E_i}} \theta(\mu - E). \quad (12.17)$$

Направим ось x вдоль квантовой нити. Обозначим $f_+(E)$ и $f_-(E)$ – плотности вероятности для электронов, движущихся в положительном и отрицательном направлениях оси x соответственно. В равновесном состоянии $f_+(E) = f_-(E) = f(E)/2$, и ток через квантовую нить равен нулю.

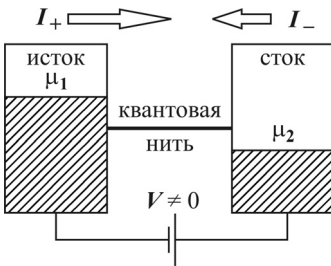


Рис. 12.4. Схематическое изображение квантовой нити, находящейся между электродами.

химический потенциал равен μ_1 . Тогда создаваемый этими электронами ток I_+ равен

$$I_+ = q_e n_{1D} \tilde{v}_+ = q_e n_{1D} \int_0^{\infty} \frac{|p_x|}{m} f_+(E) dE, \quad (12.18)$$

где $|p_x| = \sqrt{2m(E - E_i)}$. Подставляя плотность вероятности (12.17) с $\mu = \mu_1$ в (12.18), получим:

$$I_+ = \frac{q_e}{\pi \hbar} \sum_i \int_0^{\mu_1} \theta(E - E_i) dE. \quad (12.19)$$

Аналогично вычисляется ток, создаваемый электронами из правого электрода:

$$I_- = -\frac{q_e}{\pi \hbar} \sum_i \int_0^{\mu_2} \theta(E - E_i) dE. \quad (12.20)$$

Суммируя (12.19) и (12.20), получим полный ток через квантовую нить:

$$I = I_+ + I_- = \frac{q_e}{\pi \hbar} \sum_i \int_{\mu_2}^{\mu_1} \theta(E - E_i) dE = \frac{q_e (\mu_1 - \mu_2)}{\pi \hbar} n = -\frac{q_e^2}{\pi \hbar} V n, \quad (12.21)$$

где n – число уровней энергии E_n , лежащих ниже уровня химического потенциала электродов. При этом мы считаем, что разность химических потенциалов $\mu_1 - \mu_2$ меньше, чем разность между уровнями энергии, т.е. $E_n < \mu_2 < \mu_1 < E_{n+1}$. Таким образом, баллистическая проводимость квантовой нити равна

Чтобы через квантовую нить тек ток, необходимо соединить её с электродами с различными химическими потенциалами $\mu_2 - \mu_1 = q_e V$ (см. рис. 12.4). В отличие от задачи 12.2.3, будем рассматривать баллистическую проводимость, т.е. считать, что все движущиеся в положительном направлении оси x электроны попадают в квантовую нить из левого электрода, и их

$$G_n = \frac{|I|}{V} = \frac{q_e^2}{\pi\hbar} n = 2G_0 n, \quad \text{где } n = 1, 2, 3, \dots \quad (12.22)$$

Замечания.

1. При решении задачи мы использовали плотность состояний (12.16) для однородного квазиодномерного электронного газа. Однако в процессе решения задачи плотность состояний умножалась на импульс электрона, что в итоге привело к сокращению характерного для однородного электронного газа множителя $\sqrt{E - E_i}$. Можно показать, что полученное выражение (12.22) никак не связано с условием однородности электронного газа и поэтому справедливо для реальных квантовых нитей.

2. Рассмотренный в задаче случай баллистической проводимости возможен только при условии отсутствия рассеяния электронов в квантовой нити. Таким образом, формула (12.22) дает значения максимальной проводимости G_{\max} .

3. Если уровни энергии E_n не вырождены по проекции спина s_z , то вместо плотности состояний (12.16) нужно взять вдвое меньшую величину. Тогда вместо (12.22) получим $G_n = G_0 n$.

Ответ: $G_n = \frac{q_e^2}{\pi\hbar} n$, где $n = 1, 2, 3, \dots$

Задача 12.2.5. Рассмотрим двумерный нерелятивистский газ невзаимодействующих электронов на плоскости xu во внешнем магнитном поле $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$, перпендикулярном к плоскости xu . Найти уровни энергии ε_n и групповую скорость $\mathbf{v}_{\text{гр}}$ электронов. Как изменится решение задачи при наличии внешнего электрического поля $\mathbf{E} = E\mathbf{e}_y$? При решении задачи спин электронов не учитывать.

Решение

В этой и последующих задачах, связанных с двумерным электронным газом, будем считать, что все электроны находятся на нижнем энергетическом уровне E_1 (см. формулу (12.1)), и будем отсчитывать энергию электронов от этого уровня энергии: $\varepsilon \equiv E - E_1$.

В задачах **Главы 7** рассматривалась динамика спина электрона без учета его движения в пространстве. В этой главе рассмотрим движение электрона на плоскости, пренебрегая его спином. Уравнение Шредингера для частицы с нулевым спином в магнитном поле имеет вид:

$$\frac{1}{2m}(-i\hbar\nabla - q_e\mathbf{A})^2 \psi(x, y) = \epsilon\psi(x, y), \quad (12.23)$$

где \mathbf{A} – векторный потенциал электромагнитного поля. Условие $\text{rot } \mathbf{A} = \mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$ эквивалентно системе из трех уравнений:

$$\frac{\partial A_z}{\partial y} - \frac{\partial A_y}{\partial z} = 0, \quad \frac{\partial A_z}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial z} = 0, \quad \frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} = B. \quad (12.24)$$

Решение системы (12.24) неоднозначно и может быть выбрано из соображений удобства решения уравнения (12.23). Пусть $A_x = -yB$, $A_y = A_z = 0$. Тогда уравнение (12.23) имеет вид:

$$\left[\frac{1}{2m} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} + q_e B y \right)^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right] \psi(x, y) = \epsilon \psi(x, y). \quad (12.25)$$

Гамильтониан в левой части уравнения (12.25) не зависит от координаты x и поэтому коммутирует с оператором \hat{p}_x . Следовательно, можно искать решение уравнения (12.25) в виде произведения собственной функции оператора \hat{p}_x и функции, зависящей только от координаты y :

$$\psi(x, y) = \varphi(y) \exp\left(\frac{i}{\hbar} p_x x\right). \quad (12.26)$$

Подставляя (12.26) в (12.25), получим:

$$\varphi'' + \frac{2m}{\hbar^2} \left[\epsilon - \frac{1}{2m} (p_x + q_e B y)^2 \right] \varphi = 0, \quad (12.27)$$

где $\varphi'' \equiv d^2\varphi/dy^2$. Вводя обозначения

$$\omega_c = \frac{|q_e|B}{m} \quad \text{и} \quad y_0 = -\frac{p_x}{q_e B},$$

перепишем уравнение (12.27) в виде:

$$\varphi'' + \frac{2m}{\hbar^2} \left[\epsilon - \frac{m\omega_c^2}{2} (y - y_0)^2 \right] \varphi = 0. \quad (12.28)$$

Уравнение (12.28) представляет собой уравнение Шредингера для гармонического осциллятора, колеблющегося с частотой ω_c относительно точки y_0 . Частота ω_c называется *циклотронной*. Решение уравнения, аналогичного (12.28), было рассмотрено в **задачах 6.2.6 и 6.2.7**. Энергия электрона равна

$$\varepsilon_n = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad \text{где } n = 0, 1, 2, \dots \quad (12.29)$$

Энергии ε_n называются *уровнями Ландау*.

Используя выражение (12.29), вычислим групповую скорость электрона $\mathbf{v}_{\text{гр}}$:

$$\mathbf{v}_{\text{гр}} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{p}} = 0. \quad (12.30)$$

С квазиклассической точки зрения, полученные выражения (12.29) и (12.30) описывают вращение электрона с частотой ω_c относительно точки с координатой $y = y_0$.

Рассмотрим теперь случай, когда электрон находится в скрещенных магнитном $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$ и электрическом $\mathbf{E} = E\mathbf{e}_y$ полях. Напряженность \mathbf{E} постоянного электрического поля связана со скалярным потенциалом ϕ электромагнитного поля соотношением $\mathbf{E} = E\mathbf{e}_y = -\nabla\phi$. Выберем $\phi = -Ey$. Тогда вместо уравнения (12.25) получим:

$$\left[\frac{1}{2m} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} + q_e B y \right)^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} - q_e E y \right] \psi(x, y) = \varepsilon \psi(x, y). \quad (12.31)$$

Решение уравнения (12.31) ищем в виде (12.26), и вместо выражения (12.28) получаем:

$$\phi'' + \frac{2m}{\hbar^2} \left[\tilde{\varepsilon} - \frac{m\omega_c^2}{2} (y - \tilde{y}_0)^2 \right] \phi = 0, \quad (12.32)$$

где $\tilde{y}_0 = \frac{m}{q_e B} \left(\frac{E}{B} - \frac{p_x}{m} \right)$ и $\tilde{\varepsilon} = \varepsilon - p_x \left(\frac{E}{B} \right) + \frac{m}{2} \left(\frac{E}{B} \right)^2$. Для энергии $\tilde{\varepsilon}$ справедливо выражение (12.29), поэтому для энергии ε получим:

$$\varepsilon_n = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) + p_x \left(\frac{E}{B} \right) - \frac{m}{2} \left(\frac{E}{B} \right)^2, \quad \text{где } n = 0, 1, 2, \dots \quad (12.33)$$

Видно, что при наличии внешнего электрического поля уровни Ландау уширяются (см. **задачу 12.3.1**). Дифференцируя (12.33), вычислим групповую скорость электрона:

$$\mathbf{v}_{\text{гр}} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{p}} = \frac{E}{B} \mathbf{e}_x. \quad (12.34)$$

Выражение (12.34) соответствует хорошо известному классическому результату: в скрещенных электрическом и магнитном полях заряженная частица движется перпендикулярно векторам \mathbf{E} и \mathbf{B} .

Ответ: $\varepsilon_n = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) + p_x \left(\frac{E}{B} \right) - \frac{m}{2} \left(\frac{E}{B} \right)^2$, где $n = 0, 1, 2, \dots$,

$$\omega_c = \frac{|q_e|B}{m}; \quad \mathbf{v}_{\text{гр}} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{p}} = \frac{E}{B} \mathbf{e}_x.$$

Задача 12.2.6. Найти уровни энергии электрона на плоскости xu в магнитном поле $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$, используя правило квантования Бора-Зоммерфельда.

Решение

Напомним (см. **Главу 4**), что правило квантования Бора-Зоммерфельда имеет следующий вид:

$$\oint pdq = 2\pi\hbar n, \quad \text{где } n = 1, 2, 3, \dots, \quad (12.35)$$

а q и p – канонически сопряженные обобщенная координата и обобщенный импульс частицы, т.е. коммутатор операторов этих величин равен

$$[\hat{p}, \hat{q}] = -i\hbar. \quad (12.36)$$

В **задаче 12.2.5** было показано, что гамильтониан электрона (без учета его спина) в магнитном поле имеет вид:

$$\hat{H}_{2D} = \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} + q_e B y \right)^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \equiv \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{\hat{p}_y^2}{2m},$$

т.е. имеется два импульса

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} + q_e B y \quad \text{и} \quad \hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}.$$

Вычислим коммутатор $[\hat{p}_y, \hat{p}_x]$, подействовав им на произвольную дифференцируемую функцию $\chi(x, y)$:

$$[\hat{p}_y, \hat{p}_x]\chi = \left[-i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} + q_e B y \right] \chi = \left[-i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, q_e B y \right] \chi = -i\hbar q_e B \chi.$$

Поскольку функция $\chi(x, y)$ произвольная, справедливо операторное равенство:

$$[\hat{p}_y, \hat{p}_x] = -i\hbar q_e B. \quad (12.37)$$

Из сравнения (12.36) и (12.37) видно, что можно выбрать канонически сопряженные координату и импульс в виде $q = p_x/q_e B$ и $p = p_y$. В этом случае, стоящий в левой части (12.35) интеграл равен

$$\oint p dq = \frac{1}{q_e B} \oint p_y dp_x = -\frac{1}{q_e B} \iint dp_x dp_y = -\frac{1}{q_e B} S_p = \frac{S_p}{|q_e| B},$$

где S_p – площадь в импульсном пространстве, ограниченная квазиклассической траекторией движения электрона. Тогда правило квантования (12.35) может быть записано в виде:

$$S_p = 2\pi\hbar |q_e| B n, \quad \text{где} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (12.38)$$

Воспользуемся правилом квантования (12.38) для нахождения уровней Ландау. Если считать, что в координатном пространстве электрон движется по окружности с постоянным по абсолютной величине импульсом p , то его энергия равна кинетической энергии $\varepsilon = T = p^2/2m$. С другой стороны, траектория электрона в импульсном пространстве представляет собой окружность радиусом p . Площадь, ограниченная этой окружностью, равна $S_p = \pi p^2 = 2\pi m \varepsilon$. Тогда из правила квантования (12.38) получим:

$$\varepsilon_n = \hbar \frac{|q_e| B}{m} n = \hbar \omega_c n, \quad \text{где} \quad \omega_c = \frac{|q_e| B}{m}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (12.39)$$

Сравнивая (12.39) и (12.29), видим, что использование правила квантования Бора–Зоммерфельда приводит к сдвигу уровней энергии на величину $\Delta\varepsilon = \hbar\omega_c/2$ (сравните с задачей 4.2.11). Для больших квантовых чисел $n \gg 1$ этим сдвигом можно пренебречь ($\Delta\varepsilon/\varepsilon_n \ll 1$). Однако, если условие квантования (12.38) немного модернизировать:

$$S_p = 2\pi\hbar|q_e|B\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad \text{где } n = 0, 1, 2, \dots, \quad (12.40)$$

то для квадратичного закона дисперсии $\varepsilon = p^2/2m$ получается точное выражение (12.29) для уровней Ландау. Условие квантования (12.40) может быть использовано для приближенного нахождения уровней Ландау в случае, когда закон дисперсии электрона отличается от квадратичного, как это имеет место для электронов в кристаллах (см. Главу 9).

Ответ: $\varepsilon_n = \hbar\omega_c n$, где $\omega_c = \frac{|q_e|B}{m}$, $n = 1, 2, 3, \dots$

Задача 12.2.7. Рассмотрим двумерный нерелятивистский электронный газ на прямоугольной пластине размером $L_x \times L_y$. Перпендикулярно к плоскости пластины приложено внешнее магнитное поле $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$, а вдоль оси y – электрическое поле $\mathbf{E} = E\mathbf{e}_y$, причем выполняется соотношение $E/B \ll \hbar/mL_y$. Показать, что зависимость сопротивления Холла \tilde{R}_H от индукции магнитного поля B имеет ступенчатый характер. Найти значения \tilde{R}_H на ступенях. При решении задачи а) пренебречь спином электрона; б) считать, что уровень Ферми ε_F электронного газа находится между уровнями Ландау; в) считать, что каждый электрон вносит вклад в ток.

Решение

Как было показано в задаче 12.2.5, групповая скорость электрона, находящегося на двумерной пластине в скрещенных полях $\mathbf{E} = E\mathbf{e}_y$ и $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$, равна $\mathbf{v}_{\text{гр}} = (E/B)\mathbf{e}_x$. Если вклад в ток вносят все электроны, то двумерная плотность тока равна

$$\mathbf{j}_{2D} = q_e n_{2D} \mathbf{v}_{\text{гр}} = \frac{q_e n_{2D} E}{B} \mathbf{e}_x. \quad (12.41)$$

Поскольку электрический ток течет перпендикулярно внешнему электрическому полю $\mathbf{E} = E\mathbf{e}_y$, то напряженность $E \equiv E_H$ – это напряженность Холла, рассмотренная в **Главе 10**. Выражая её из формулы (12.41), получим:

$$E_H = \frac{j_{2D,x}B}{q_en_{2D}} \equiv R_H j_{2D,x}B \equiv -\tilde{R}_H j_{2D,x}, \quad (12.42)$$

где $R_H \equiv 1/q_en_{2D}$ – двумерный коэффициент Холла, определенный по аналогии с трехмерным случаем (см. **Главу 10**), $\tilde{R}_H \equiv -R_H B$ – *сопротивление Холла*, с которым удобнее работать в двумерном случае. В том, что коэффициент \tilde{R}_H имеет размерность сопротивления, можно убедиться, умножив формулу (12.42) на ширину пластинки L_y . Тогда $j_{2D,x}L_y = I$ – ток, текущий в пластинке, $E_H L_y = V_H$ – напряжение Холла, и из (12.42) получаем $|I|\tilde{R}_H = |V_H|$.

Выразим из формулы (12.42) сопротивление Холла:

$$\tilde{R}_H = \frac{B}{|q_e|n_{2D}}. \quad (12.43)$$

На первый взгляд, из формулы (12.43) следует линейная зависимость сопротивления Холла \tilde{R}_H от магнитной индукции B . Однако, как будет показано ниже, формула (12.43) справедлива только для дискретного набора значений B_n^* .

Как показано в **задаче 12.2.5**, энергия электронов во внешнем магнитном поле принимает дискретные значения ϵ_n , называемые уровнями Ландау. В этой и двух последующих задачах нам будет удобнее нумеровать уровни Ландау, начиная с единицы, т.е.

$$\epsilon_n = \hbar\omega_c \left(n - \frac{1}{2} \right), \quad \text{где } n = 1, 2, 3, \dots \quad (12.44)$$

Предположим, что уровень Ферми ϵ_F электронного газа находится между n -м и $(n+1)$ -м уровнями Ландау, т.е. $\epsilon_n < \epsilon_F < \epsilon_{n+1}$. При низкой температуре все n уровней Ландау, лежащих ниже уровня Ферми, полностью заполнены электронами. Если пренебречь вырождением по спину, то кратность вырождения каждого уровня Ландау равна $g = |q_e|BL_x L_y / 2\pi\hbar$ (см. **задачу 12.3.1**). Таким

образом, двумерная концентрация электронов, находящихся на одном полностью заполненном уровне Ландау, равна $|q_e|B/2\pi\hbar$, а полная концентрация электронов равна

$$n_{2D} = \frac{|q_e|B}{2\pi\hbar} n, \quad \text{где } n = 1, 2, 3, \dots \quad (12.45)$$

Подставляя (12.45) в (12.43), получим, что если уровень Ферми лежит между уровнями Ландау, то сопротивление Холла равно

$$\tilde{R}_H = \frac{2\pi\hbar}{q_e^2} \frac{1}{n}, \quad \text{где } n = 1, 2, 3, \dots, \quad (12.46)$$

где $n = 1, 2, 3, \dots$ – число уровней Ландау, лежащих ниже уровня Ферми. Сравнивая (12.43) и (12.46), видим, что при фиксированной концентрации n_{2D} формула (12.43) справедлива только для дискретного набора значений магнитной индукции:

$$B_n^* = \frac{2\pi\hbar}{|q_e|} \frac{n_{2D}}{n}, \quad \text{где } n = 1, 2, 3, \dots$$

Если при изменении магнитного поля n -й уровень Ландау пересекает уровень Ферми, как показано на рис. 12.5, то сопротивление Холла изменяется скачком. Значения магнитной индукции B_n , при которых происходят эти скачки, определяются из равенства $\epsilon_F = \epsilon_n$. Энергия Ферми двумерного электронного газа (без учета вырождения по спину) равна*

$$\epsilon_F = \frac{2\pi\hbar^2}{m} n_{2D}. \quad (12.47)$$

Тогда из уравнения

$$\frac{2\pi\hbar^2}{m} n_{2D} = \hbar \frac{|q_e|B}{m} \left(n - \frac{1}{2} \right)$$

находим значения магнитной индукции B_n , при которых происходят скачки сопротивления Холла:

$$B_n = \frac{2\pi\hbar}{|q_e|} \frac{n_{2D}}{(n-1/2)}, \quad \text{где } n = 1, 2, 3, \dots$$

* Здесь мы использовали результат задачи 8.4.4, умноженный на 2, поскольку при решении задачи 8.4.4 было учтено вырождение по проекции спина s_z .

Зависимость сопротивления Холла от магнитной индукции представлена на рис. 12.6. При больших значениях n ступенчатая зависимость \tilde{R}_H от B переходит в линейную зависимость (12.43).

Замечания.

1. При решении задачи были сделаны три предположения. Во-первых, мы пренебрегли спином электрона. Отказаться от этого предположения довольно просто. При этом в гамильтониан \hat{H}_{2D} нужно добавить слагаемое $\mu_B(\sigma\mathbf{B})$ (см. Главу 7). Здесь важно подчеркнуть, что рассматриваемый электронный газ находится в кристалле, поэтому эффективная масса электрона, входящая в магнетон Бора, не совпадает с массой, входящей в циклотронную частоту ω_c . Вследствие этого

число уровней Ландау на самом деле в два раза больше, однако все они невырождены по проекции спина s_z . Это означает, что полученные выражения для степени вырождения g уровней Ландау и сопротивления Холла \tilde{R}_H остаются справедливыми. Другими словами, при учете спина электрона высота ступенек на рис. 12.6 останется такой же, длина ступенек уменьшится, а самих ступенек будет в два раза больше.

2. Обсудим теперь предположения б) и в) из условия задачи. Легко понять, что для идеального двумерного электронного газа они не могут быть выполнены. Действительно, у идеального

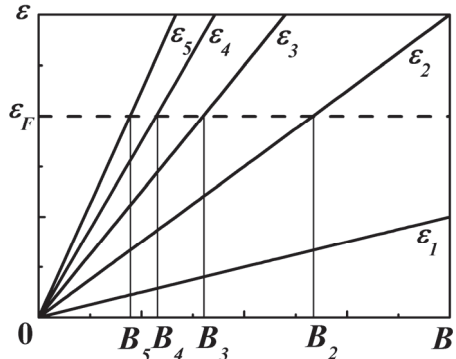


Рис. 12.5. Зависимость энергии электрона на уровне Ландау от магнитной индукции. Пунктиром показан уровень Ферми.

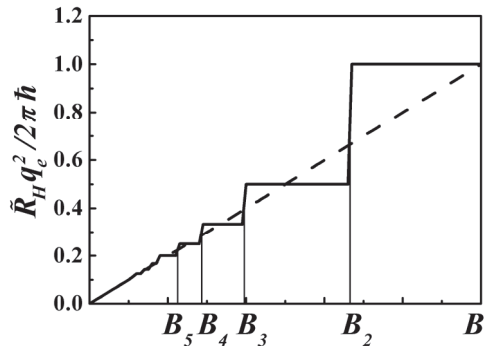


Рис. 12.6. Зависимость сопротивления Холла от магнитной индукции. Пунктиром показана классическая зависимость (12.43).

электронного газа нет состояний, лежащих между уровнями Ландау, поэтому уровень Ферми будет совпадать с одним из уровней Ландау, что противоречит предположению б). Кроме того, электроны на полностью заполненных уровнях Ландау, лежащих ниже уровня Ферми, не могут принимать участия в электропроводности, так как согласно принципу Паули они не имеют возможности изменить своё квантовое состояние. Это противоречит предположению в). Однако, если в кристалле имеются дефекты, то часть электронов локализуется на этих дефектах и не принимает участия в электропроводности. При этом наличие локализованных электронов, энергии которых лежат между уровнями Ландау, приводит к двум важным эффектам. *Во-первых*, наличие локализованных состояний приводит к тому, что уровень Ферми может располагаться между уровнями Ландау (предположение б). *Во-вторых*, электроны, находящиеся на уровнях Ландау, за счет взаимодействия с локализованными электронами получают возможность изменять свое состояние, т.е. участвовать в процессе электропроводности (предположение в). Таким образом, наличие дефектов не только не мешает наблюдать квантовый эффект Холла, но и является одной из основных причин его проявления!

Ответ: $\tilde{R}_H = \frac{2\pi\hbar}{q_e^2} \frac{1}{n}$, где

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

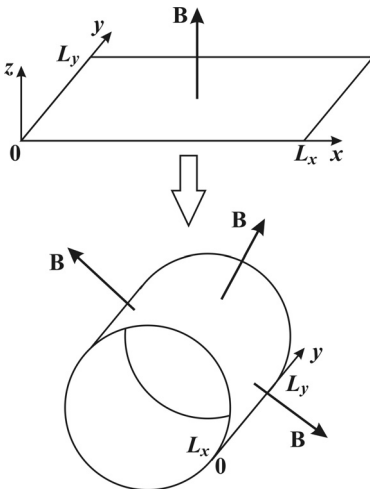


Рис. 12.7. Мысленный эксперимент Р. Лафлина.

Задача 12.2.8. Рассмотрим двумерный нерелятивистский электронный газ на прямоугольной пластине размером $L_x \times L_y$, находящийся в скрещенных полях $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$ и $\mathbf{E} = E\mathbf{e}_y$. Проведем мысленный эксперимент*: соединим концы пластины так, как это показано на рис. 12.7, т.е. свернем прямоугольник в ци-

* Лафлин, 1981.

цилиндр, длина окружности основания которого L_x , а высота L_y . При этом будем считать, что в каждой точке магнитное поле остается перпендикулярным к пластинке. Сделаем калибровочное преобразование $\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A}' = \mathbf{A} + A_0 \mathbf{e}_x$, где $A_0 = \text{const}$, найти сопротивление Холла \tilde{R}_H .

Решение

Рассмотрим сначала случай, когда напряженность электрического поля равна нулю: $\mathbf{E} = 0$. При калибровочном преобразовании

$$\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A}' = \mathbf{A} + A_0 \mathbf{e}_x \quad (12.48)$$

изменяется гамильтониан двумерного электронного газа:

$$\hat{H}_{2D} \rightarrow \hat{H}'_{2D} = \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} + q_e B y - q_e A_0 \right)^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2}.$$

При этом магнитное поле $\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A}$ не изменяется, а следовательно, не изменяется и энергия электронов $\epsilon'_n = \epsilon_n$, где ϵ_n – уровни Ландау (12.29). Волновая функция электрона $\psi'(x, y)$ является решением уравнения Шредингера с гамильтонианом \hat{H}'_{2D} . По аналогии с (12.26), ищем его решение в виде:

$$\psi'(x, y) = \varphi(y) \exp\left(\frac{i}{\hbar} p'_x x\right), \quad (12.49)$$

где функция $\varphi(y)$ является решением уравнения

$$\varphi'' + \frac{2m}{\hbar^2} \left[\epsilon - \frac{1}{2m} (p'_x + q_e B y - q_e A_0)^2 \right] \varphi = 0. \quad (12.50)$$

Уравнение (12.50) совпадает с (12.27) при условии

$$p'_x = p_x + q_e A_0. \quad (12.51)$$

Подставляя (12.51) в (12.49), найдем преобразование волновой функции:

$$\psi(x, y) \rightarrow \psi'(x, y) = \psi(x, y) \exp\left(\frac{i}{\hbar} q_e A_0 x\right), \quad (12.52)$$

т.е. при калибровочном преобразовании (12.48) изменяется фаза волновой функции.

Если мысленно свернуть пластинку длиной L_x в цилиндр, то волновая функция $\psi'(x, y)$ станет периодической по координате x . Из условия $\psi'(x, y) = \psi'(x + L_x, y)$ и выражения (12.52) получим

$$A_0 L_x = \frac{2\pi\hbar}{|q_e|} n, \quad \text{где } n = 1, 2, 3, \dots \quad (12.53)$$

Величина $A_0 L_x$ равна потоку Φ магнитного поля через основание цилиндра. Действительно,

$$A_0 L_x = \oint \mathbf{A} d\mathbf{l} = \int \text{rot } \mathbf{A} d\mathbf{S} = \int \mathbf{B} d\mathbf{S} = \Phi.$$

Из условия (12.53) получаем, что поток магнитного поля через основание цилиндра принимает только дискретные значения:

$$\Phi_n = n\Phi_0, \quad \text{где } \Phi_0 = \frac{2\pi\hbar}{|q_e|}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (12.54)$$

Величина Φ_0 называется *квантом магнитного потока*.

Как было показано в задаче 12.2.5, каждый электрон на уровне Ландау характеризуется числом y_0 , которое можно интерпретировать как центр квазиклассической орбиты электрона. Найдем изменение y_0 при калибровочном преобразовании (12.48):

$$\Delta y_0 = y'_0 - y_0 = -\frac{p'_x}{q_e B} + \frac{p_x}{q_e B} = -\frac{A_0}{B}.$$

Если магнитный поток через основание цилиндра меняется на один квант магнитного потока Φ_0 , то центр каждой орбиты электрона смещается на расстояние

$$\Delta y_0 = -\frac{\Phi_0}{BL_x} = -\frac{2\pi\hbar}{|q_e|BL_x} = -\frac{2\pi\hbar}{|q_e|BL_x L_y} L_y = -\frac{L_y}{g},$$

где g – кратность вырождения уровня Ландау (см. задачу 12.3.1).

Этот результат можно интерпретировать следующим образом: g электронов на уровне Ландау друг за другом смещаются на одно и то же расстояние $-L_y/g$, т.е. с одного края цилиндра на другой (вдоль оси y) переносится заряд $\Delta q = |q_e|$. Если заполнены n уровней Ландау, то при калибровочном преобразовании с одного края цилиндра на другой переносится заряд $\Delta q = n|q_e|$.

Рассмотрим теперь случай, когда напряженность электрического поля равна $\mathbf{E} = E\mathbf{e}_y$. При переносе заряда $\Delta q = n|q_e|$ с одного края цилиндра на другой энергия системы изменяется на величину

$$\Delta \varepsilon = -n|q_e|V_H. \quad (12.55)$$

Чтобы вычислить ток, протекающий в цилиндре при калибровочном преобразовании (12.48), воспользуемся известной формулой из классической электродинамики, связывающей вариацию векторного потенциала с вариацией функции Гамильтона:

$$\delta H = -\int (\mathbf{j} \delta \mathbf{A}) dV. \quad (12.56)$$

В двумерном случае формула (12.56) имеет вид:

$$\delta H_{2D} = -\int (\mathbf{j}_{2D} \delta \mathbf{A}) dS. \quad (12.57)$$

В нашем случае $\mathbf{j}_{2D} = \text{const}$ и $\delta \mathbf{A} = A_0 \mathbf{e}_x$, поэтому вариация функции Гамильтона равна $\delta H_{2D} = -j_{2D,x} A_0 L_x L_y = -I \Phi$, откуда

$$I = -\frac{\partial \delta H_{2D}}{\partial \Phi} = -\frac{\partial H_{2D}}{\partial \Phi}. \quad (12.58)$$

В квантовой теории вместо (12.58) имеет место аналогичное соотношение между операторами:

$$\hat{I} = -\frac{\partial \hat{H}_{2D}}{\partial \Phi}, \quad (12.59)$$

где \hat{I} – оператор электрического тока. Чтобы найти средний ток, текущий в цилиндре, необходимо вычислить интеграл

$$I = \int \psi^*(x, y) \hat{I} \psi(x, y) dx dy, \quad (12.60)$$

где $\psi(x, y)$ – одночастичная волновая функция*, нормированная условием $\int \psi^*(x, y) \psi(x, y) dx dy = 1$. Подставляя (12.59) в (12.60) и используя условие нормировки волновой функции, а также эрмитовость гамильтониана $\hat{H}_{2D}^+ = \hat{H}_{2D}$, найдем:

* В приближении невзаимодействующих электронов, для вычисления тока можно использовать одночастичный гамильтониан \hat{H}_{2D} и одночастичную волновую функцию $\psi(x, y)$.

$$\begin{aligned}
 I &= -\int \psi^* \frac{\partial \hat{H}_{2D}}{\partial \Phi} \psi dx dy = -\frac{\partial}{\partial \Phi} \int \psi^* \hat{H}_{2D} \psi dx dy + \int \frac{\partial \psi^*}{\partial \Phi} \hat{H}_{2D} \psi dx dy + \\
 &+ \int \psi^* \hat{H}_{2D} \frac{\partial \psi}{\partial \Phi} dx dy = -\frac{\partial \varepsilon}{\partial \Phi} + \varepsilon \left(\int \frac{\partial \psi^*}{\partial \Phi} \psi dx dy + \int \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial \Phi} dx dy \right) = \\
 &= -\frac{\partial \varepsilon}{\partial \Phi} + \varepsilon \frac{\partial}{\partial \Phi} \int \psi^* \psi dx dy = -\frac{\partial \varepsilon}{\partial \Phi}.
 \end{aligned}$$

Отсюда следует, что при изменении магнитного потока через основание цилиндра на величину Φ_0 в цилиндре протекает ток

$$I = -\frac{\Delta \varepsilon}{\Phi_0} = \frac{n |q_e| V_H}{\Phi_0} = \frac{n q_e^2}{2\pi \hbar} V_H. \quad (12.61)$$

Здесь мы воспользовались полученными выше выражениями (12.54) и (12.55). Из выражения (12.61) находим сопротивление Холла:

$$\tilde{R}_H = \frac{V_H}{I} = \frac{2\pi \hbar}{q_e^2} \frac{1}{n}, \quad \text{где } n=1,2,3,\dots$$

В результате мы снова получили выражение (12.46), однако при этом были использованы более фундаментальные соображения, чем при решении **задачи 12.2.7**.

Замечания.

1. Как отмечалось в **задаче 12.2.7**, существование локализованных электронов является необходимым условием для наблюдения квантового эффекта Холла. Однако остался непонятным следующий вопрос. Почему выражение (12.46) не зависит от концентрации локализованных электронов? **Задача 12.2.8** позволяет ответить на этот вопрос. Действительно, при калибровочном преобразовании (12.48) квантовые состояния электронов на уровне Ландау сдвигаются на величину $\Delta y_0 = -L_y/g$. При этом происходит перенос заряда с одного края пластины на другой. Если часть электронов локализуется и «выключается» из «сдвигового процесса», то на уровне Ландау остается $g' < g$ нелокализованных электронов, каждый из которых «сдвигается» на величину $\Delta y'_0 = -L_y/g'$. Таким образом, перенос заряда Δq с одного края пластины на другой не зависит от количества локализованных электронов, и выражение (12.55) не изменяется. Формула (12.61) была получена для невзаимодействующих нелокализованных

электронов и не зависит от их концентрации, поэтому она справедлива и при наличии локализованных электронов. Следовательно, выражение (12.46) не зависит от концентрации локализованных электронов и должно с высокой точностью описывать сопротивление Холла различных образцов, что в действительности наблюдается в эксперименте.

2. В приближении невзаимодействующих электронов перенос заряда осуществляется только отдельными электронами. Однако в системе взаимодействующих электронов при низких температурах ~ 1 К могут образовываться солитоны с дробным (в единицах $|q_e|$) зарядом. Тогда перенос заряда может осуществляться с помощью таких солитонов, и число n в формуле (12.46) может принимать дробные значения. Такое явление впервые наблюдалось в 1981 году и получило название *дробный квантовый эффект Холла*.

3. В процессе решения задачи было получено выражение для кванта магнитного потока $\Phi_0 = 2\pi\hbar/|q_e|$. В данном случае квантование магнитного потока возникает в результате мысленного эксперимента и является лишь промежуточным этапом при выводе формулы (12.46). Однако квантование магнитного потока может наблюдаться и в реальных экспериментах. Например, квантуется магнитный поток через сверхпроводящее кольцо. Здесь необходимо отметить, что за бездиссипативный ток в сверхпроводниках отвечают не отдельные электроны, а куперовские пары электронов. Заряд куперовской пары равен $q = 2q_e$, поэтому квант магнитного потока в сверхпроводящем кольце равен $\Phi_0 = \pi\hbar/|q_e|$.

Ответ: $\tilde{R}_H = \frac{2\pi\hbar}{q_e^2} \frac{1}{n}$, где $n = 1, 2, 3, \dots$

Задача 12.2.9. Рассмотрим двумерный нерелятивистский электронный газ на прямоугольной пластине размером $L_x \times L_y$, находящийся в скрещенных полях $\mathbf{V} = V\mathbf{e}_z$ и $\mathbf{E} = E\mathbf{e}_y$. Считая границы образца идеально ровными, показать, что вдоль границ в направлении оси x течет бездиссипативный электрический ток. Исходя из этого, вычислить сопротивление Холла \tilde{R}_H .

Решение

В отличие от задач 12.2.7 и 12.2.8, будем считать, что дефектов в прямоугольной пластине, на которой находится электронный газ, нет, а границы пластины идеально ровные.

Рассмотрим сначала случай $\mathbf{E} = 0$. Как уже обсуждалось в задаче 12.2.5, каждый электрон на уровне Ландау характеризуется

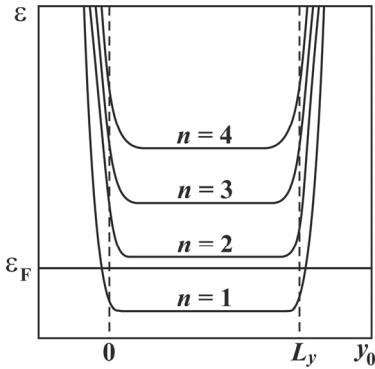


Рис. 12.8. Зависимость энергии электрона на уровне Ландау от координаты y_0 центра его квазиклассической орбиты.

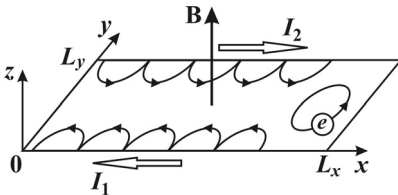


Рис. 12.9. Классическое представление о движении электрона на двумерной пластинке.

от краев пластины, движутся по окружностям и не дают вклада в электрический ток. Электроны, находящиеся вблизи краев пластины, за счет рассеяния на этих краях получают возможность двигаться, причем в противоположных направлениях на различных краях пластины. Поэтому токи на разных краях пластины текут в противоположные стороны.

координатой y_0 своей квазиклассической орбиты. Если y_0 находится далеко от границ пластинки, то энергия электрона определяется формулой (12.29). Если же координата y_0 близка к краям пластины, то потенциальная энергия в уравнении (12.32) имеет не квадратичный вид, а резко возрастает вблизи края пластины. Вследствие этого возрастает энергия электрона. Зависимость энергии электрона на уровне Ландау от координаты y_0 центра его орбиты схематически показана на рис. 12.8. В результате уровень Ферми оказывается посередине между уровнями Ландау.

Чтобы понять, что происходит в пластинке, проще всего обратиться к классическому представлению о движении электронов. Как видно из рис. 12.9, электроны, находящиеся вдали

Будем считать, что уровень Ферми находится между первым и вторым уровнями Ландау $\varepsilon_1 < \varepsilon_F < \varepsilon_2$. Плотность состояний электронов на краю пластины можно записать в виде:

$$\rho(\varepsilon) = \frac{dn_s}{d\varepsilon} = \frac{dn_s}{dk} \bigg/ \frac{d\varepsilon}{dk} = \frac{L_x}{2\pi} \frac{1}{\hbar v_{\text{гp}}} \theta(\varepsilon - \varepsilon_1). \quad (12.62)$$

Здесь мы воспользовались определением групповой скорости и тем фактом, что объем одного квантового состояния в одномерном пространстве волновых векторов равен $2\pi/L_x$. Появление в выражении (12.62) функции Хевисайда $\theta(\varepsilon - \varepsilon_1)$ связано с тем, что энергия электронов, находящихся на первом уровне Ландау, не может быть меньше ε_1 . Как и в задачах 12.2.7 и 12.2.8, мы пренебрегли наличием у электрона спина. Тогда ток, текущий при температуре $T = 0$ К вдоль края $y = 0$ пластины, можно вычислить аналогично формуле (12.18):

$$I_1 \equiv I(y = 0) = q_e n_{1D} \bar{v}_{\text{гp}} = q_e n_{1D} \int_0^{\infty} v_{\text{гp}} f(\varepsilon) d\varepsilon = \frac{q_e}{2\pi\hbar} (\mu - \varepsilon_1), \quad (12.63)$$

где $f(\varepsilon) = \frac{\rho(\varepsilon)}{N} \theta(\mu - \varepsilon) = \frac{1}{2\pi n_{1D}} \frac{1}{\hbar v_{\text{гp}}} \theta(\varepsilon - \varepsilon_1) \theta(\mu - \varepsilon)$ – функция

плотности вероятности, $n_{1D} = N/L_x$ – одномерная концентрация электронов вдоль края пластины, $\mu = \varepsilon_F$ – химический потенциал электронов. Ток, текущий вдоль края $y = L_y$ пластины, вычисляется аналогично (12.63):

$$I_2 \equiv I(y = L_y) = -\frac{q_e}{2\pi\hbar} (\mu - \varepsilon_1).$$

Дополнительный знак « \leftarrow » связан с тем, что токи на разных краях пластины текут в противоположные стороны. Суммарный ток $I_1 + I_2$ равен нулю.

Если напряженность электрического поля $\mathbf{E} = E_y \mathbf{e}_y$ отлична от нуля, то химические потенциалы электронов на разных концах пластины не равны друг другу: $\mu_1 - \mu_2 = q_e V_H$. Полный ток, текущий вдоль краев пластины, равен

$$I = I_1 + I_2 = \frac{q_e}{2\pi\hbar} (\mu_1 - \mu_2) = \frac{q_e^2}{2\pi\hbar} V_H. \quad (12.64)$$

Если ниже уровня Ферми находится не один, а n уровней Ландау, то все они дают одинаковый вклад в ток, и суммарный ток будет равен

$$I = \frac{nq_e^2}{2\pi\hbar} V_H. \quad (12.65)$$

Из формулы (12.65) получаем величину сопротивления Холла:

$$\tilde{R}_H = \frac{V_H}{I} = \frac{2\pi\hbar}{q_e^2} \frac{1}{n}, \quad \text{где } n = 1, 2, 3, \dots$$

Таким образом, мы пришли в тому же результату, что и в **задачах 12.2.7 и 12.2.8**. Однако интерпретация квантового эффекта Холла в данном случае совершенно иная.

Замечание. Если, используя формулу (12.65), вычислить величину, обратную сопротивлению Холла, то получим $\tilde{G} = I/V_H = nG_0$, где G_0 – квант проводимости. Видно, что между квантовым эффектом Холла и квантовой проводимостью можно провести некоторые аналогии. При этом нужно помнить о существенном отличии этих явлений. Если в случае квантовой проводимости (**задачи 12.2.3 и 12.2.4**) электрическое поле \mathbf{E} совпадает по направлению с вектором плотности тока \mathbf{j} , то в случае квантового эффекта Холла эти векторы перпендикулярны друг другу $\mathbf{E} \perp \mathbf{j}$. Кроме того, если в **задачах 12.2.3 и 12.2.4** речь шла о максимальной проводимости, то в случае эффекта Холла проводимость \tilde{G} всегда совпадает с максимальной, поскольку текущий вдоль краев пластины ток бездиссипативен. Это связано с двумя обстоятельствами. *Во-первых*, край пластины является одномерным объектом, поэтому электрон вдоль края может двигаться только в двух направлениях. *Во-вторых*, чтобы электрон начал двигаться в обратном направлении, он должен перескочить на противоположный край пластины, а такие события маловероятны. Таким образом, рассеяние электронов на краю пластины не приводит к уменьшению тока.

Ответ: $\tilde{R}_H = \frac{2\pi\hbar}{q_e^2} \frac{1}{n}$, где $n = 1, 2, 3, \dots$

12.3. Короткие задачи

Задача 12.3.1. Двумерный электронный газ в однородном магнитном поле $\mathbf{V} = Ve_z$, рассмотренный в задаче 12.2.5, находится в прямоугольной области с линейными размерами L_x и L_y . Найти кратность вырождения g уровней Ландау без учета вырождения по спину. Найти ширину уровней Ландау, если разность потенциалов между краями прямоугольной области равна V_y .

Решение

С квазиклассической точки зрения движение электрона в магнитном поле можно представить как вращение относительно точки с координатой $\tilde{y}_0 = \frac{m}{q_e B} \left(\frac{E}{B} - \frac{p_x}{m} \right)$ по круговой орбите радиусом r_n . Все электроны, движущиеся по орбитам с одинаковыми радиусами, имеют одинаковую энергию ϵ_n , т.е. принадлежат одному и тому же уровню Ландау. При этом различные орбиты одинакового радиуса отличаются друг от друга положением их центра, т.е. координатой \tilde{y}_0 . Координата \tilde{y}_0 должна лежать внутри рассматриваемой двумерной области, т.е. $\Delta\tilde{y} = \tilde{y}_{\max} - \tilde{y}_{\min} = L_y$. Интервалу значений $\Delta\tilde{y}$ соответствует интервал значений $\Delta p_x = L_y |q_e| B$. В этом интервале находится $\Delta p_x / \delta p_x$ квантовых состояний, где $\delta p_x = 2\pi\hbar / L_x$ – объем одного квантового состояния. Таким образом, без учета вырождения по спину кратность вырождения g уровней Ландау равна

$$g = \frac{\Delta p_x}{\delta p_x} = \frac{|q_e| B}{2\pi\hbar} L_x L_y. \quad (12.66)$$

Если в формуле (12.33) пренебречь слагаемым, содержащим $(E/B)^2$, то ширина уровня Ландау равна

$$\delta\epsilon = \Delta p_x \left(\frac{E}{B} \right) = L_y |q_e| B \left(\frac{E}{B} \right) = |q_e| E L_y = |q_e V_y| \quad (12.67)$$

Замечание. Чтобы ширина $\delta\epsilon$ уровня Ландау была пренебрежимо мала по сравнению с расстоянием $\Delta\epsilon = \hbar\omega_c$ между

уровнями, необходимо, чтобы выполнялось условие $E/B \ll \hbar/mL_y$. При этом слагаемым, квадратичным по E/B , в формуле (12.33) действительно можно пренебречь по сравнению с линейным по E/B слагаемым.

Ответ: $g = \frac{|q_e|B}{2\pi\hbar} L_x L_y$, $\delta\varepsilon = |q_e V_y|$.

Задача 12.3.2. Найти радиусы квазиклассических орбит r_n электронов, соответствующих уровням Ландау ε_n .

Решение

Если считать, что электрон движется по окружности радиусом r_n с круговой частотой ω_c , то его скорость равна $v_n = \omega_c r_n$, а кинетическая энергия равна $T_n = mv_n^2/2$. Приравнявая T_n к энергии электрона ε_n , из уравнения

$$\frac{m\omega_c^2 r_n^2}{2} = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad \text{где} \quad \omega_c = \frac{|q_e|B}{m},$$

найдем:

$$r_n = \sqrt{\frac{\hbar(2n+1)}{|q_e|B}}, \quad \text{где} \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (12.68)$$

Ответ: $r_n = \sqrt{\frac{\hbar(2n+1)}{|q_e|B}}$, где $n = 0, 1, 2, \dots$

Задача 12.3.3. Найти магнитный поток Φ_n через площадь, ограниченную квазиклассической орбитой электрона, находящегося на уровне Ландау. Магнитное поле \mathbf{B} направлено перпендикулярно плоскости движения электрона.

Решение

С квазиклассической точки зрения, электрон на уровне Ландау движется по окружности радиусом r_n (см. задачу 12.3.2). Площадь, ограниченная этой окружностью, равна $S = \pi r_n^2$. Тогда магнитный поток через эту площадь равен

$$\Phi_n = BS = B\pi r_n^2 = \frac{2\pi\hbar}{|q_e|} \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad \text{где } n = 0, 1, 2, \dots \quad (12.69)$$

Здесь мы воспользовались выражением (12.68) для радиусов r_n . Из формулы (12.69) видно, что разность магнитных потоков $\Phi_{n+1} - \Phi_n$ через квазиклассические орбиты электронов, находящихся на соседних уровнях Ландау, равна кванту магнитного потока $\Phi_0 = 2\pi\hbar/|q_e|$.

Ответ: $\Phi_n = \frac{2\pi\hbar}{|q_e|} \left(n + \frac{1}{2} \right)$, где $n = 0, 1, 2, \dots$

Задача 12.3.4. Используя квазиклассическую формулу (12.40) найти уровни Ландау в графене. Закон дисперсии электронов и дырок в графене при малых значениях энергии имеет вид: $\epsilon(\mathbf{p}) = \pm v_{\text{гр}} |\mathbf{p}|$, где знак «+» соответствует электронам, а знак «-» – дыркам, $v_{\text{гр}}$ – групповая скорость электронов и дырок при малых энергиях. При решении задачи пренебречь спином электрона и наличием в графене двух эквивалентных подрешеток.

Решение

Как в задаче 12.2.6, будем считать, что траектория электрона в импульсном пространстве представляет собой окружность радиусом p . Площадь, ограниченная этой окружностью, равна $S_p = \pi p^2$. Выражая отсюда модуль импульса p и подставляя его в закон дисперсии для электронов (дырок), получим:

$$\epsilon(\mathbf{p}) = \pm v_{\text{гр}} |\mathbf{p}| = \pm v_{\text{гр}} \sqrt{\frac{S_p}{\pi}}.$$

Подставляя сюда S_p из условия квантования (12.40), получим:

$$\epsilon_n = \pm v_{\text{гр}} \sqrt{2\hbar |q_e| B \left(n + \frac{1}{2} \right)}, \quad \text{где } n = 0, 1, 2, \dots \quad (12.70)$$

Таким образом, уровни Ландау в графене не эквидистантны. Расстояние $\Delta\epsilon_n$ между уровнями при больших значениях $n \gg 1$ убывает пропорционально $1/\sqrt{n}$. Действительно,

$$\Delta \varepsilon_n = |\varepsilon_{n+1} - \varepsilon_n| = v_{\text{гp}} \sqrt{2\hbar |q_e| B} \left(\sqrt{n + \frac{3}{2}} - \sqrt{n + \frac{1}{2}} \right) \approx v_{\text{гp}} \sqrt{\frac{\hbar |q_e| B}{2n}}.$$

Замечание. Выражение (12.70) лишь качественно совпадает с уровнями Ландау в графене при $n \gg 1$. При малых значениях n эффекты, связанные с наличием у электрона спина и существованием в графене двух эквивалентных подрешеток, приводят не только к существенному смещению, но и перемешиванию электронных и дырочных уровней.

Ответ: $\varepsilon_n = \pm v_{\text{гp}} \sqrt{2\hbar |q_e| B} \left(n + \frac{1}{2} \right)$, где $n = 0, 1, 2, \dots$

12.4. Задачи для самостоятельного решения

Задача 12.4.1 (11.6 [1]). Полупроводниковая пленка из InSb имеет толщину $L = 10$ нм. У массивного полупроводника InSb имеется прямая энергетическая щель между потолком валентной зоны и дном зоны проводимости, равная $E_g = 0,18$ эВ. Определить сдвиг края полосы поглощения в пленке по отношению к положению края для массивных образцов. Считать, что потенциальная энергия электрона внутри пленки равна нулю, а вне пленки – бесконечна. Эффективные массы электронов и дырок равны $m_e = 0,013m_0$ и $m_h = 0,4m_0$, где m_0 – масса электрона в вакууме.

Ответ: $\Delta\lambda = -3730$ нм.

Задача 12.4.2 (D11.3 [1]). Изобразите схематически энергетический спектр дырок в магнитном поле для однозонного дырочного полупроводника, считая, что эффективная масса электрона больше циклотронной.

Задача 12.4.3. Показать, что выражение для плотности состояний квазидвумерного электронного газа

$$\rho(E) = \frac{m}{\pi\hbar^2} S \sum_{n=1}^{\infty} \theta(E - E_n), \text{ где } E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m(\Delta z)^2} n^2,$$

при $\Delta z \rightarrow \infty$ переходит в выражение для плотности состояний трехмерного электронного газа.

Задача 12.4.4. Показать, что выражение для плотности состояний квазиодномерного электронного газа

$$\rho(E) = \frac{\sqrt{2m}}{\pi\hbar} L \sum_{n,k} \frac{\theta(E - E_{nk})}{\sqrt{E - E_{nk}}}, \text{ где } E_{nk} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{n^2}{(\Delta z)^2} + \frac{k^2}{(\Delta y)^2} \right),$$

при $\Delta y \rightarrow \infty$ переходит в выражение для плотности состояний квазидвумерного электронного газа.

Задача 12.4.5. Используя правило квантования (12.40), найти уровни Ландау для двумерного электронного газа, если закон дисперсии для электронов имеет вид:

$$\varepsilon = \frac{p_x^2}{2m_1} + \frac{p_y^2}{2m_2}.$$

Ответ: $\varepsilon_n = \hbar \frac{|q_e|B}{\sqrt{m_1 m_2}} \left(n + \frac{1}{2} \right)$, где $n = 0, 1, 2, \dots$

Задача 12.4.6. Показать, что если закон дисперсии для двумерного электронного газа представим в виде $\varepsilon = f(|\mathbf{p}|)$, то при $n \gg 1$ уровни Ландау описываются функцией

$$\varepsilon_n = f \left(\sqrt{2\hbar |q_e| B \left(n + \frac{1}{2} \right)} \right).$$

Задача 12.4.7. Пусть энергия электронов в квантовой нити описывается формулой (12.4), причем $\Delta z = \Delta y$ и $\frac{\pi^2 \hbar^2}{m(\Delta z)^2} = 1$ эВ.

Найти баллистическую проводимость квантовой нити, если электроды сделаны из а) калия ($\varepsilon_F = 2,12$ эВ), б) натрия ($\varepsilon_F = 3,23$ эВ), в) лития ($\varepsilon_F = 4,72$ эВ), г) золота ($\varepsilon_F = 5,51$ эВ).

Ответ: а) $2G_0$, б) $6G_0$, в) $8G_0$, г) $12G_0$, где $G_0 = \frac{q_e^2}{2\pi\hbar}$.

Задача 12.4.8. Пусть энергия электронов в квантовой нити описывается формулой (12.4), причем $\Delta z = \Delta y$ и

$\pi^2 \hbar^2 / m (\Delta z)^2 = 1$ эВ. В квантовой нити имеется дефект в виде атома примеси. Потенциальную энергию электрона вблизи атома примеси можно представить в виде: $U(x) = A\delta(x - x_0)$, где $A = \text{const} < 0$, а x_0 – положение атома примеси в квантовой нити. Считая, что $mA^2/2\hbar^2 = 1$ эВ и что энергия Ферми электродов $\epsilon_F = 3,5$ эВ, найти баллистическую проводимость квантовой нити. При решении задачи рассмотреть два случая: а) на дефекте могут рассеиваться электроны с любым направлением спина, б) на дефекте рассеиваются только электроны со спином «вверх».

Ответ: а) $\frac{24}{7}G_0$, б) $\frac{33}{7}G_0$, где $G_0 = \frac{q_e^2}{2\pi\hbar}$.

Задача 12.4.9. Показать, что плотность потока вероятности частицы с зарядом q в магнитном поле равна

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2m} \left[\Psi^* (-i\hbar\nabla - q\mathbf{A}) \Psi + \Psi (-i\hbar\nabla - q\mathbf{A})^* \Psi^* \right].$$

Задача 12.4.10. Используя результат задачи 12.4.9, вычислить ток, текущей в прямоугольной пластине размером $L_x \times L_y$ в скрещенных полях $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$ и $\mathbf{E} = E\mathbf{e}_y$. Концентрация двумерного электронного газа $n_{2D} = N_e/L_x L_y = \text{const}$.

Ответ: $I = q_e N_e \iint j_x dy dz = q_e n_{2D} \frac{E}{B} L_y$.

Список литературы

1. Миронова Г.А., Брандт Н.Н., Салецкий А.М., Поляков О.П., Трубаев О.О. Введение в квантовую физику в вопросах и задачах. – М.: Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, 2012. – 320 с.

ПРИЛОЖЕНИЕ

1. Фундаментальные физические постоянные

Постоянная Планка	\hbar	$1,055 \cdot 10^{-34}$ Дж·с
	h	$6,626 \cdot 10^{-34}$ Дж·с
Скорость света	c	$2,998 \cdot 10^8$ м·с ⁻¹
Заряд электрона	$ q_e $	$1,602 \cdot 10^{-19}$ Кл
Масса электрона	m_e	$9,109 \cdot 10^{-31}$ кг
Масса протона	m_p	$1,673 \cdot 10^{-27}$ кг
Постоянная Больцмана	k_B	$1,381 \cdot 10^{-23}$ Дж·К ⁻¹
Постоянная Авогадро	N_A	$6,022 \cdot 10^{23}$ моль ⁻¹

2. Удобные внесистемные единицы

1 эВ	$1,602 \cdot 10^{-19}$ Дж
1 кэВ	$1,602 \cdot 10^{-16}$ Дж
1 МэВ	$1,602 \cdot 10^{-13}$ Дж
1 ГэВ	$1,602 \cdot 10^{-10}$ Дж
1 нм	10^{-9} м
1 Å	10^{-10} м

3. Часто встречающиеся величины

Энергия покоя электрона	$m_e c^2$	511 кэВ
Энергия покоя протона	$m_p c^2$	938 МэВ
Квадрат «заряда» электрона	$e^2 = \frac{ q_e ^2}{4\pi\epsilon_0}$	$2,307 \cdot 10^{-28}$ Дж·м
Постоянная тонкой структуры	$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$	$\frac{1}{137}$
Комптоновская длина волны электрона	$\lambda_K = \frac{h}{m_e c}$	$2,426 \cdot 10^{-12}$ м
Боровский радиус электрона в атоме водорода	$a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2}$	0,529 Å
Энергия ионизации атома водорода (Ридберг)	$1 \text{ Ry} = \frac{m_e e^4}{2\hbar^2}$	13,6 эВ
Постоянная Ридберга	$R_\infty = \frac{1 \text{ Ry}}{2\pi\hbar c}$	$1,0974 \cdot 10^7$ м ⁻¹
Постоянная Вина	$b = 0,2014 \frac{2\pi\hbar c}{k}$	$2,897 \cdot 10^{-3}$ м·К
Объемная постоянная Стефана-Больцмана	$\alpha = \frac{\pi^2 k^4}{15\hbar^3 c^3}$	$7,57 \cdot 10^{-16}$ Дж·м ⁻³ ·К ⁻⁴
Поверхностная постоянная Стефана-Больцмана	$\sigma = \frac{\pi^2 k^4}{60\hbar^3 c^2}$	$5,67 \cdot 10^{-8}$ Вт·м ⁻² ·К ⁻⁴
Магнетон Бора	$\mu_B = \frac{ q_e \hbar}{2m_e}$	$9,27 \cdot 10^{-24}$ Дж·Тл ⁻¹
Квант проводимости	$G_0 = \frac{q_e^2}{2\pi\hbar}$	$(25,8 \text{ кОм})^{-1}$