МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ЛУГАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ ВЛАДИМИРА ДАЛЯ»

СТАХАНОВСКИЙ ИНЖЕНЕРНО-ПЕДАГОГИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ
(ФИЛИАЛ)
ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ЛУГАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ ВЛАДИМИРА ДАЛЯ»

КАФЕДРА ОБЩЕИНЖЕНЕРНЫХ ДИСЦИПЛИН

МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ

к практическим занятиям по дисциплине
«ФИЗИКА»
для студентов направления подготовки
Профессиональное обучение (по отраслям),

профили «Экономика и управление», «Информационные технологии и системы», «Электроснабжение», «Безопасность технологических процессов и производств», «Горное дело. Подземная разработка пластовых месторождений», «Горное дело. Электромеханическое оборудование, автоматизация процессов добычи полезных ископаемых и руд», «Горное дело. Технологическая безопасность и горноспасательное дело», «Профессиональная психология», «Управление персоналом» (в 9-и частях). Часть 8.2. Элементы квантовой механики

Луганск 2023

УДК 530

Рекомендовано к изданию Учебно-методическим советом
ГОУ ВО «ЛГУ им. В. Даля»
(протокол № ___ от _______ 20 г.)

Методические указания к практическим занятиям по дисциплине **«Физика»** для студентов направления подготовки **Профессиональное обучение (по отраслям)**, профили: «Экономика и управление», «Информационные технологии и системы», «Электроснабжение», «Безопасность технологических процессов и производств», «Горное дело. Подземная разработка пластовых месторождений», «Горное дело. Электромеханическое оборудование, автоматизация процессов добычи полезных ископаемых и руд», «Горное дело. Технологическая безопасность и горноспасательное дело», «Профессиональная психология», «Управление персоналом» (в 9-и частях). **Часть 8.2. Элементы квантовой механики**. /Сост.: В.И. Сафонов. − **Стаханов**: ФГБОУ ВО «ЛГУ им. В. Даля», 2023. – 50 с.

В методических указаниях приведен минимальный объём теоретических сведений, необходимых для подготовки к практическим занятиям по разделу «Элементы квантовой механики» общего курса физики, примеры решения задач и задачи для самостоятельного решения.

Предназначены для студентов профиля «Экономика и управление», «Информационные технологии и системы», «Электроснабжение», «Безопасность технологических процессов и производств», «Горное дело. Подземная разработка пластовых месторождений», «Горное дело. Электромеханическое оборудование, автоматизация процессов добычи полезных ископаемых и руд», «Горное дело. Технологическая безопасность и горноспасательное дело», «Профессиональная психология», «Управление персоналом».

Составитель: доц. Сафонов В.И.

Ответственный за выпуск: доц. Сафонов В.И.

Рецензент: доц. Петров А.Г.

Содержание

Раздел 8.2.
ЭЛЕМЕНТЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Цель: Освоить изученный теоретический материал на примерах и закрепить его, решив самостоятельно задачи.

8.2.1. Волновые свойства микрочастиц
Основные формулы

• Формула де Бройля, выражающая связь длины волн с импульсом p движущейся частицы, для двух случаев:

а) в классическом приближении ($v \ll c$; $p = m_0 v$)

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

б) в релятивистском случае (скорость u частицы сравнима со скоростью c света в вакууме

$$p = mv^2 = \frac{m_0 v}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}};$$

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{m_0 v}\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}.$$

• Связь длины волны де Бройля с кинетической энергией T частицы:

а) в классическом приближении $\lambda = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_0 T}}$;

б) в релятивистском случае $\lambda = \frac{2\pi\hbar c}{\sqrt{R(T + 2E_0)}}$, где E_0 – энергия покоя частицы ($E_0 = m_0 c^2$).

• Фазовая скорость волн де Бройля

$$v = \frac{\omega}{k},$$

где ω – круговая частота;

k – волновое число, $k = \frac{2\pi}{\lambda}$.

• Групповая скорость волн де Бройля

$$u = \frac{d\omega}{dk}.$$

• Соотношения де Бройля:

$E = \hbar\omega$, $p = \hbar k$,

где E – энергия движущейся частицы;

p – импульс частицы;

k – волновой вектор,

$$|k| = k = \frac{2\pi}{\lambda};$$

$\hbar$ – постоянная Планка, $\hbar = \dfrac{h}{2\pi} = 1{,}05 \cdot 10^{-34}$ Дж·с.

• Соотношения неопределенностей:

а) для координаты и импульса частицы

$\Delta p \Delta x \geq \hbar$,

где Δp_x – неопределенность проекции импульса частицы на ось x;

Δx – неопределенность ее координаты;

б) для энергии и времени

$\Delta E \Delta t \geq \hbar$,

где ΔE – неопределенность энергии данного квантового состояния;

Δt – время пребывания системы в этом состоянии.

8.2.1.1. Примеры решения задач

Пример 1. Электрон, начальной скоростью которого можно пренебречь, прошел ускоряющую разность потенциалов U. Найти длину волны де Бройля λ для двух случаев: 1) $U_1 = 51$ кВ; 2) $U_2 = 510$ кВ.

Решение. Длина волны де Бройля λ частицы зависит от ее импульса p и определяется формулой

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p}. \tag{1}$$

Импульс частицы можно определить, если известна ее кинетическая энергия T. Связь импульса с кинетической энергией для нерелятивистского (когда $T \ll E_0$) и для релятивистского (когда $T \approx E_0$) случаев соответственно выражается формулами:

$$p = \sqrt{2m_0 T}; \tag{2}$$

$$p = \frac{1}{c}\sqrt{(2E_0T)T}\,. \qquad (3)$$

Формула (1) с учетом соотношений (2) и (3) запишется соответственно в нерелятивистском и релятивистском случаях:

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_0T}}\,; \qquad (4)$$

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{\frac{1}{c}\sqrt{(2E_0 + T)T}}\,. \qquad (5)$$

Сравним кинетические энергии электрона, прошедшего заданные в условии задачи разности потенциалов $U_1 = 51$ кВ и $U_2 = 510$ кВ, с энергией покоя электрона и в зависимости от этого решим вопрос, которую из формул (4) и (5) следует применить для вычисления длины волны де Бройля.

Как известно, кинетическая энергия электрона, прошедшего ускоряющую разность потенциалов U,

$T = |e|U.$

В первом случае $T_1 = |e|(U_1 = 51$ эВ $= 0{,}51 \cdot 10^{-4}$ МэВ, что много меньше энергии покоя электрона $E_0 = m_0c^2 = 0{,}51$ МэВ. Следовательно, можно применить формулу (4).

Для упрощения расчетов заметим, что $T_1 = 10^{-4}m_0c^2$. Подставив это выражение в формулу (4), перепишем ее в виде

$$\lambda_1 = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_0 \cdot 10^{-4} m_0 c}} = \frac{10^2}{\sqrt{2}}\frac{2\pi\hbar}{m_0c}\,.$$

Учтя, что $\frac{2\pi\hbar}{m_0c}$ есть комптоновская длина волны λ_C, получим

$$\lambda_1 = \frac{10^2}{\sqrt{2}}\lambda_C\,.$$

Так как $\lambda_C = 2{,}43 \cdot 10^{-12}$ м, то

$$\lambda_1 = \frac{10^2}{\sqrt{2}} \cdot 2{,}43 \cdot 10^{-12} = 172 \cdot 10^{-12} \text{ м}.$$

Во втором случае кинетическая энергия $T_2 = |\mathrm{e}|\, U_2 = 510$ кэВ $= 0{,}51$ МэВ, т.е. равна энергии покоя электрона. Следовательно, необходимо применить релятивистскую формулу (5).

Учтя, что $T_2 = 0{,}51$ МэВ $= mc^2$, по формуле (5) найдем

$$\lambda_2 = \frac{2\pi\hbar}{\frac{1}{c}\sqrt{(2m_0c^2 + m_0c^2)m_0c^2}} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{3}m_0c} \quad \text{или} \quad \lambda_0 - \frac{\lambda_C}{\sqrt{3}}.$$

Подставив значение λ_C в последнюю формулу и произведя вычисления, получим

$\lambda_2 = 1{,}4$ пм.

Пример 2. На узкую щель шириной $a = 1$ мкм направлен параллельный пучок электронов, имеющих скорость $v = 3{,}65$ Мм/с. Учитывая волновые свойства электронов, определить расстояние x между двумя максимумами интенсивности первого порядка в дифракционной картине, полученной на экране, отстоящем на $L = 10$ см от щели.

Решение. Согласно гипотезе де Бройля, длина волны λ, соответствующая частице массой m, движущейся со скоростью v, выражается формулой

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{mv}. \qquad (1)$$

Дифракционный максимум при дифракции на одной щели наблюдается при условии

$$\alpha\sin(\varphi) = (2k+1)\frac{\lambda}{2}, \qquad (2)$$

где $k = 0, 1, 2, 3, \ldots$ – порядковый номер максимумов;

α – ширина щели.

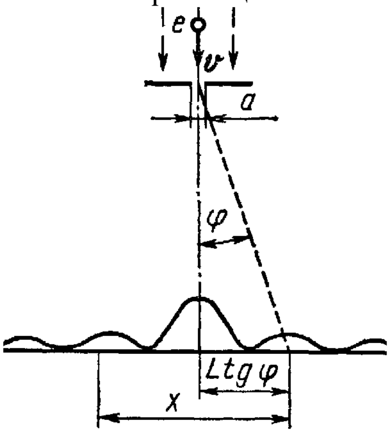

Рис. 8.4

Для максимумов первого порядка ($k = 1$) угол φ заведомо мал, поэтому $\sin(\varphi) = \varphi$, и, следовательно, формула (2) примет вид

$$\alpha\varphi = \frac{3}{2}\lambda, \qquad (3)$$

а искомая величина x, как следует из рис. 8.4,

$$x = 2L\,\mathrm{tg}(\varphi) = 2L\varphi, \qquad (4)$$

так как $\mathrm{tg}\,\varphi = \varphi$.

Подставив значение φ из соотношения (3) в формулу (4), получим

$$x = 2L\frac{3}{2}\frac{\lambda}{a} = 3\frac{L\lambda}{a}.$$

Подстановка в последнее равенство длины волны де Бройля по формуле (1) дает

$$x = 6\frac{\pi\hbar L}{amv}. \qquad (5)$$

После вычисления по формуле (5) получим

$x = 6 \cdot 10^{-5}$ м = 60 мкм.

Пример 3. На грань кристалла никеля падает параллельный пучок электронов. Кристалл поворачивают так, что угол скольжения θ изменяется. Когда этот угол становится равным 64°, наблюдается максимальное отражение электронов, соответствующее дифракционному максимуму первого порядка. Принимая расстояние d между атомными плоскостями кристалла равным 200 пм, определить длину волны де Бройля λ электронов и их скорость v.

Решение. К расчету дифракции электронов от кристаллической решетки применяется то же уравнение Вульфа-Брэгга, которое используется в случае рентгеновского излучения:

$2d\sin(\theta) = k\lambda$,

где d – расстояние между атомными плоскостями кристалла;

θ – угол скольжения;

k – порядковый номер дифракционного максимума;

λ – длина волны де Бройля.

Очевидно, что

$$\lambda = \frac{2d\sin(\theta)}{k}.$$

Подставив в эту формулу значения величин и вычислив, получим

λ = 360 пм.

Из формулы длины волны де Бройля $\lambda = \frac{2\pi\hbar}{mv}$ выразим скорость электрона:

$$v = \frac{2\pi\hbar}{m\lambda}.$$

Подставив в эту формулу значения π, $\hbar$, m (масса электрона), и произведя вычисления, получим

$v = 2$ Мм/с.

Пример 4. Кинетическая энергия T электрона в атоме водорода составляет величину порядка 10 эВ. Используя соотношение неопределенностей, оценить минимальные линейные размеры атома.

Решение. Неопределенность координаты и импульса электрона связаны соотношением

$$\Delta x \Delta p \geq \hbar, \tag{1}$$

где Δx – неопределенность координаты электрона;

Δp – неопределенность его импульса.

Из этого соотношения следует, что чем точнее определяется положение частицы в пространстве, тем более неопределенным становится импульс, а, следовательно, и энергия частицы.

Пусть атом имеет линейные размеры l, тогда электрон атома будет находиться где-то в пределах области с неопределенностью $\Delta x = \frac{l}{2}$. Соотношение неопределенностей (1) можно записать в этом случае в виде $\frac{l}{2}\Delta p \geq \hbar$, откуда

$$l \geq \frac{2\hbar}{\Delta p}. \tag{2}$$

Физически разумная неопределенность импульса Δp, во всяком случае, не должна превышать значения самого импульса p, т.е.

$\Delta p \leq p$

Импульс p связан с кинетической энергией T соотношением $p = \sqrt{2mT}$. Заменим Δp значением $\sqrt{2mT}$ (такая замена не увеличит l). Переходя от неравенства (2) к равенству, получим

$$l_{\min} = \frac{2\hbar}{\sqrt{2mT}}.$$

Подставив числовые значения и произведя вычисления, получим

$l_{\min} = 124$ пм.

Пример 5. Используя соотношение неопределенностей энергии и времени, определить естественную ширину $\Delta\lambda$ спектральной линии излучения атома при переходе его из возбужденного состояния в основное. Среднее время τ жизни атома в возбужденном состоянии принять равным 10^{-8} с, а длину волны λ излучения – равной 600 нм.

$\Gamma\tau \sim \hbar$.

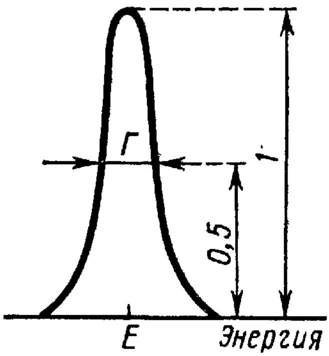

Рис. 8.5

Решение. При переходе атомов из возбужденного состояния в основное существует некоторый разброс (неопределенность) в энергии испускаемых фотонов. Это связано с тем, что энергия возбужденного состояния не является точно определенной, а имеет конечную ширину Г (рис. 8.5). Согласно соотношению неопределенностей энергии и времени, ширина Г энергетического уровня возбужденного состояния связана со средним временем τ жизни атомов в этом состоянии соотношением

Тогда ширина энергетического уровня определяется выражением

$$\Gamma = \frac{\hbar}{\tau}.$$

Вследствие конечной ширины уровня энергии возбужденного состояния энергия фотонов, испускаемых атомами, также имеет разброс, равный ширине энергетического уровня, т.е.

$\Delta\varepsilon = \Gamma$.

Тогда

$$\Delta\varepsilon = \frac{\hbar}{\tau}. \qquad (1)$$

Поскольку энергия е фотона связана с длиной волны λ соотношением

$$\varepsilon = \frac{2\pi\hbar c}{\lambda},$$

то разбросу $\Delta\varepsilon$ (при $\Delta\varepsilon \ll \varepsilon$) энергии соответствует разброс $\Delta\lambda$ длин волн ($\Delta\lambda \ll \lambda$)

$$\Delta\varepsilon = \frac{2\pi\hbar c}{\lambda^2}\Delta\lambda. \qquad \text{(знак минус опущен)} \qquad (2)$$

Входящий в это выражение конечный интервал длин волн $\Delta\lambda$ и есть естественная ширина спектральной линии. Выразив $\Delta\lambda$ из формулы (2) и заменив $\Delta\varepsilon$ согласно (1), получим

$$\Delta\lambda = \frac{\lambda^2}{2\pi c\tau}.$$

Произведем вычисления, получим:

$\Delta\lambda = 2\cdot10^{-14}$ м = 20 фм.

8.2.1.2. Вопросы и задачи для самостоятельного решения

Волны де Бройля

45.1. Определить длину волны де Бройля λ характеризующую волновые свойства электрона, если его скорость $v = 1$ Мм/с. Сделать такой же подсчет для протона.

45.2. Электрон движется со скоростью $v = 200$ Мм/с. Определить длину волны де Бройля λ, учитывая изменение массы электрона в зависимости от скорости.

45.3. Какую ускоряющую разность потенциалов U должен пройти электрон, чтобы длина волны де Бройля λ была равна 0,1 нм?

45.4. Определить длину волны де Бройля λ электрона, если его кинетическая энергия $T = 1$ кэВ.

45.5. Найти длину волны де Бройля λ протона, прошедшего ускоряющую разность потенциалов U: 1) 1 кВ; 2) 1 МВ.

45.6. Найти длину волны де Бройля λ для электрона, движущегося по круговой орбите атома водорода, находящегося в основном состоянии.

45.7. Определить длину волны де Бройля λ, электрона, находящегося на второй орбите атома водорода.

45.8. С какой скоростью движется электрон, если длина волны де Бройля λ электрона равна его комптоновской длине волны λ_C.

45.9. Определить длину волны де Бройля λ электронов, бомбардирующих антикатод рентгеновской трубки, если граница сплошного рентгеновского спектра приходится на длину волны $\lambda = 3$ нм.

45.10. Электрон движется по окружности радиусом $r = 0{,}5$ см в однородном магнитном поле с индукцией $B = 8$ мТл. Определить длину волны де Бройля λ электрона.

45.11. На грань некоторого кристалла под углом $\alpha = 60°$ к ее поверхности падает параллельный пучок электронов, движущихся с одинаковой скоростью. Определить скорость v электронов, если они испытывают интерференционное отражение первого порядка. Расстояние d между атомными плоскостями кристаллов равно 0,2 нм.

45.12. Параллельный пучок электронов, движущихся с одинаковой скоростью $v = 1$ Мм/с, падает нормально па диафрагму с длинной щелью шириной $\alpha = 1$ мкм. Проходя через щель, электроны рассеиваются и образуют дифракционную картину на экране, расположенном на расстоянии $l = 50$ см от щели и параллельном плоскости диафрагмы. Определить линейное расстояние x между первыми дифракционными минимумами.

45.13. Узкий пучок электронов, прошедших ускоряющую разность потенциалов $U = 30$ кВ, падает нормально на тонкий листок золота, проходит через него и рассеивается. На фотопластинке. расположенной за листком на расстоянии $l = 20$ см от него, получена дифракционная картина, состоящая из круглого центрального пятна и ряда концентрических окружностей. Радиус первой окружности $l = 3{,}4$ мм. Определить: 1) угол θ отражения электронов от микрокристаллов золота, соответствующий первой окружности (угол измеряется от поверхности кристалла); 2) длину волны де Бройля λ электронов; 3) постоянную a кристаллической решетки золота.

Фазовая и групповая скорости.

45.14. Прибор зарегистрировал скорость распространения электромагнитного импульса. Какую скорость зарегистрировал прибор – фазовую или групповую?

45.15. Можно ли измерить фазовую скорость?

45.16. Волновой «пакет» образован двумя плоскими монохроматическими волнами:

$\xi_1(x,t) = \cos(1002t - 3x)$;

$\xi_2(x,t) = \cos(1003t - 3{,}01x)$.

Определить фазовые скорости v_1 и v_2 каждой волны и групповую скорость u волнового «пакета».

45.17. Известно, что фазовая скорость $v = \omega/k$. Найти выражения фазовой скорости волн де Бройля в нерелятивистском и релятивистском случаях.

45.18. Фазовая скорость волн де Бройля больше скорости света в вакууме (в релятивистском случае). Не противоречит ли это постулатам теории относительности?

45.19. Зная общее выражение групповой скорости, найти групповую скорость u волн де Бройля в нерелятивистском и релятивистском случаях.

45.20. Написать закон дисперсии (т.е. формулу, выражающую зависимость фазовой скорости от длины волны) волн де Бройля в нерелятивистском и релятивистском случаях.

45.21. Будут ли расплываться в вакууме волновые пакеты, образованные из волн: 1) электромагнитных; 2) де Бройля?

Соотношение неопределенностей

45.22. Определить неточность Δx в определении координаты электрона, движущегося в атоме водорода со скоростью $v = 1{,}5 \cdot 10^6$ м/с, если допускаемая неточность Δv в определении скорости составляет 10 % от ее величины. Сравнить полученную неточность с диаметром d атома водорода, вычисленным по теории Бора для основного состояния, и указать, применимо ли понятие траектории в данном случае.

45.23. Электрон с кинетической энергией $T = 15$ эВ находится в металлической пылинке диаметром $d = 1$ мкм. Оценить относительную неточность Δv, с которой может быть определена скорость электрона.

45.24. Во сколько раз дебройлевская длина волны λ частицы меньше неопределенности Δx ее координаты, которая соответствует относительной неопределенности импульса в 1 %?

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

45.26. Используя соотношение неопределенностей $\Delta x \Delta p_x \geq \hbar$ найти выражение, позволяющее оценить минимальную энергию E электрона, находящегося в одномерном потенциальном ящике шириной l.

45.27. Используя соотношение неопределенностей $\Delta x \Delta p \geq \hbar$ оценить низший энергетический уровень электрона в атоме водорода. Принять линейные размеры атома $l \approx 0{,}1$ нм.

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

45.29. Показать, используя соотношение неопределенностей, что в ядре не могут находиться электроны. Линейные размеры ядра принять равными 5 фм.

45.30. Рассмотрим следующий мысленный эксперимент. Пусть моноэнергетический пучок электронов ($T = 10$ эВ) падает на щель шириной a. Можно считать, что если электрон прошел через щель, то его координата известна с неточностью $\Delta x = \alpha$. Оценить получаемую при этом относительную неточность в определении импульса $\Delta p/p$ электрона в двух случаях: 1) $a = 10$ нм; 2) $a = 0{,}1$ нм.

8.2.2. Простейшие случаи движения микрочастиц

Основные формулы

• Одномерное временное уравнение Шредингера

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2},$$

где i – мнимая единица, $i = \sqrt{-1}$;

m – масса частицы;

$\psi\,(x,t)$ – волновая функция, описывающая состояние частицы.

Волновая функция, описывающая одномерное движение свободной частицы

$$\psi(x,t) = A\exp\frac{i}{\hbar}(px - Et),$$

где A – амплитуда волны де Бройля;

p – импульс частицы;

E – энергия частицы.

Одномерное уравнение Шредингера для стационарных состояний

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\psi = 0,$$

где E – полная энергия частицы;

$U\,(x)$ – потенциальная энергия;

$\psi(x)$ – координатная (или амплитудная) часть волновой функции

Для случая трех измерений $\psi(x, y, z,)$ уравнение Шредингера

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\psi=0$$

или в операторной форме

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

где $\Delta=\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}$ – оператор Лапласа.

При решении уравнения Шредингера следует иметь в виду стандартные условия, которым должна удовлетворять волновая функция: конечность (во всем пространстве), однозначность, непрочность самой ψ-функции и ее первой производной.

• Вероятность dW обнаружить частицу в интервале от x до $x + dx$ (в одномерном случае) выражается формулой

$$dW = [\psi(x)]^2 dx?$$

где $[\psi(x)]^2$ – плотность вероятности.

Вероятность W обнаружить частицу в интервале от x_1 до x_2 находится интегрированием dW в указанных пределах

$$W=\int\limits_{x_1}^{x_2}|\,\psi_n(x)\,|^2\,dx\,.$$

• Собственное значение энергии E_n частицы, находящейся на n-м энергетическом уровне в бесконечно глубоком одномерном прямоугольном потенциальном ящике, определяется формулой

$$E_n=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}n^2 \qquad \text{(здесь } n = 1, 2, 3, \ldots\text{)},$$

где l – ширина потенциального ящика.

Соответствующая этой энергии собственная волновая функция имеет вид

$$\psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{l}}\sin(\frac{\pi n}{l}x)\,.$$

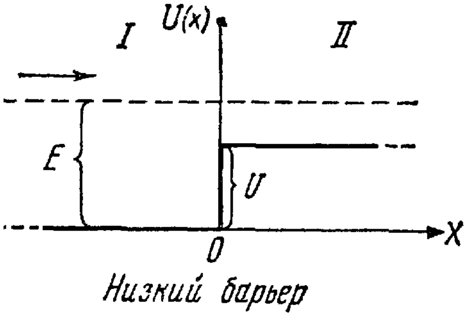

Рис. 8.6

• Коэффициент преломления n волн де Бройля на границе низкого потенциального барьера бесконечной ширины (такой барьер называют также потенциальной ступенью, если при переходе из области I в область 77 потенциальная энергия частицы уменьшается) (рис. 8.6)

$$n = \frac{\lambda_1}{\lambda_2} = \frac{k_2}{k_1},$$

где λ_1 и λ_2 – длины волн де Бройля в областях I и II (частица движется из области I в область II); k_1, k_2 – соответствующие значения волновых чисел.

• Коэффициенты отражения ρ и пропускания τ волн де Бройля через низкий ($U < E$) потенциальный барьер бесконечной ширины

$$\rho = \left|\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right|^2;$$

$$\tau = \frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2},$$

где k_1 и k_2 – волновые числа волн де Бройля в областях I и II.

• Коэффициент прозрачности D прямоугольного потенциального барьера конечной ширины

$$D \approx \exp\left[-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U-E)}d\right],$$

где U – высота потенциального барьера;

E – энергия частицы;

d – ширина барьера.

8.2.2.1. Примеры решения задач

Пример 1. Электрон находится в бесконечно глубоком одномерном прямоугольном потенциальном ящике шириной l. Вычислить вероятность того, что электрон, находящийся в возбужденном состоянии ($n = 2$), будет обнаружен в средней трети ящика.

Решение. Вероятность W обнаружить частицу в интервале $x_1 < x < x_2$ определяется равенством

$$W = \int_{x_1}^{x_2} |\psi_n(x)|^2 \, dx, \qquad (1)$$

где $\psi(x)$ – нормированная собственная волновая функция, отвечающая данному состоянию.

Нормированная собственная волновая функция, описывающая состояние электрона в потенциальном ящике, имеет вид

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin(\frac{\pi n}{l} x).$$

Возбужденному состоянию ($n = 2$) отвечает собственная функция

$$\psi_2(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin(\frac{2\pi}{l} x). \qquad (2)$$

Подставив $\psi_2(x)$ в подынтегральное выражение формулы (1) и вынося постоянные величины за знак интеграла, получим

$$W = \frac{2}{l} \int_{x_1}^{x_2} \sin^2 \frac{2\pi}{l} x dx. \qquad (3)$$

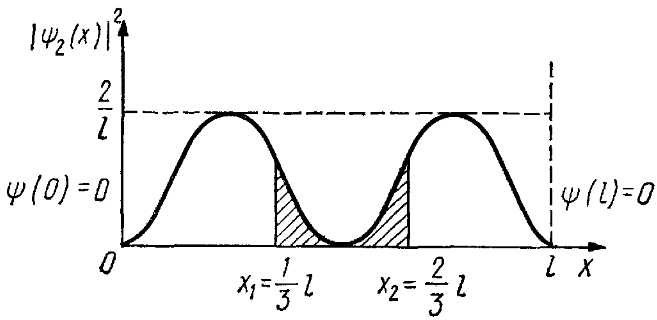

Рис. 8.7

Согласно условию задачи, $x_1 = {}^1/_3 l$ и $x_2 = {}^2/_3 l$ (рис. 8.7). Подставим эти пределы интегрирования в формулу (3), произведем замену

$$\sin^2\left(\frac{2\pi}{l} x\right) = \frac{1}{2}\left(1 - \cos\left(\frac{4\pi}{l} x\right)\right)$$

и разобьем интеграл на два:

$$W = \frac{2}{l} \int_{\frac{l}{3}}^{\frac{2l}{3}} \sin^2\left(\frac{2\pi}{l} x\right) dx = \frac{1}{l} \left\{ \int_{\frac{l}{3}}^{\frac{2l}{3}} dx - \int_{\frac{l}{3}}^{\frac{2l}{3}} \cos\left(\frac{4\pi}{l} x\right) dx \right\} =$$

$$=\frac{1}{l}\left\{\frac{l}{3}-\frac{l}{4\pi}\sin\left(\frac{4\pi}{l}x\right)\Bigg|_{\frac{l}{3}}^{\frac{2l}{3}}\right\}=\frac{1}{3}-\frac{1}{4\pi}\left(\sin\left(\frac{8\pi}{3}\right)-\sin\left(\frac{4\pi}{3}\right)\right).$$

Заметив, что $\sin\left(\frac{8\pi}{3}\right)=\sin\left(\frac{\pi}{3}\right)$, а $\sin\left(\frac{4\pi}{3}\right)=-\sin\left(\frac{\pi}{3}\right)$, получим

$$W=0{,}195$$

Пример 2. Моноэнергетический поток электронов (E = 100эВ) падает на низкий прямоугольный потенциальный барьер (прямоугольный потенциальный барьер называется низким, если энергия E частицы больше высоты U потенциального барьера, в противном случае барьер называется высоким) бесконечной ширины (рис. 1). Определить высоту потенциального барьера U, если известно, что 4 % падающих на барьер электронов отражается.

Решение. Коэффициент отражения ρ от низкого потенциального барьера выражается формулой

$$\rho=\left|\frac{k_1-k_2}{k_1+k_2}\right|^2,$$

где k_1 и k_2 – волновые числа, отвечающие движению электронов в областях *I* и *II* (см. рис. 1).

В области *I* кинетическая энергия электрона равна E и волновое число

$$k_1=\frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}.$$

Поскольку координата электрона не определена, то импульс электрона определяется точно и, следовательно, в данном случае можно говорить о точном значении кинетической энергии.

В области *II* кинетическая энергия электрона равна $(E-U)$ и волновое число

$$k_2=\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E-U)}.$$

Коэффициент отражения может быть записан в виде

$$\rho=\left(\frac{\sqrt{2mE}-\sqrt{2m(E-U)}}{\sqrt{2mE}+\sqrt{2m(E-U)}}\right)^2.$$

Здесь в случае низкого потенциального барьера k_1 и k_2 действительны, а знак модуля можно опустить.

Разделим числитель и знаменатель дроби на $\sqrt{2mE}$:

$$\rho = \left(\frac{1 - \sqrt{1 - \dfrac{U}{E}}}{1 + \sqrt{1 + \dfrac{U}{E}}} \right)^2 .$$

Решая уравнение относительно $\sqrt{1 - \dfrac{U}{E}}$, получим

$$\sqrt{1 - \frac{U}{E}} = \frac{1 - \sqrt{\rho}}{1 + \sqrt{\rho}} .$$

Возведя обе части равенства в квадрат, найдем высоту потенциального барьера:

$$U = \left[1 - \left(\frac{1 - \sqrt{\rho}}{1 + \sqrt{\rho}} \right) \right] E .$$

Подставив сюда значения величин и произведя вычисления, получим

$U = 55{,}6$ эВ.

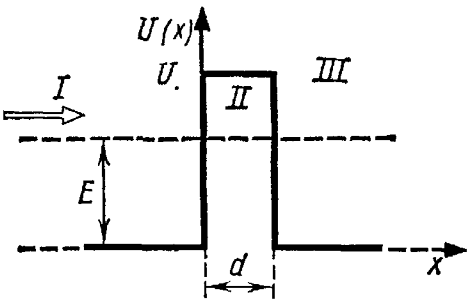

Рис. 8.8

Пример 3. Электрон с энергией $E = 4{,}9$ эВ движется в положительном направлении оси x (рис. 8.8). Высота U потенциального барьера равна 5 эВ. При какой ширине d барьера вероятность W прохождения электрона через него будет равна 0,2?

Решение. Вероятность W прохождения частицы через потенциальный барьер по своему физическому смыслу совпадает с коэффициентом прозрачности $D (W = D)$. Тогда вероятность того, что электрон пройдет через прямоугольный потенциальный барьер, выразится соотношением

$$W \approx \exp\left[-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U - E)} d \right], \qquad (1)$$

где m – масса электрона.

Потенцируя это выражение, получим

$$\ln W = -\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U-E)}d .$$

Для удобства вычислений изменим знак у правой и левой части этого равенства и найдем d:

$$d = \frac{\hbar \ln \frac{1}{W}}{2\sqrt{2m(U-E)}} .$$

Входящие в эту формулу величины выразим в единицах СИ и произведем вычисления:

$d = 4{,}95 \cdot 10^{-10}$ м = 0,945 нм.

Учитывая, что формула (1) приближенная и вычисления носят оценочный характер, можно принять $d \approx 0{,}5$ нм.

8.2.2.2. Вопросы и задачи для самостоятельного решения

Уравнение Шредингера

46.1. Написать уравнение Шредингера для электрона, находящегося в водородоподобном атоме.

46.2. Написать уравнение Шредингера для линейного гармонического осциллятора. Учесть, что сила, возвращающая частицу в положение равновесия, $f = -\beta x$, где β – коэффициент пропорциональности, x – смещение.

46.3. Временная часть уравнения Шредингера имеет вид $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = E\psi$. Найти решение уравнения.

46.4. Написать уравнение Шредингера для свободного электрона, движущегося в положительном направлении оси X со скоростью v. Найти решение этого уравнения.

46.5. Почему при физической интерпретации волновой функции говорят не о самой ψ-функции, а о квадрате ее модуля ψ^2?

46.6. Чем обусловлено требование конечности ψ-функции?

46.7. Уравнение Шредингера для стационарных состояний имеет вид $\frac{\partial^2 \psi}{\partial x} + \frac{2m}{\hbar^2}(U - E)\psi = 0$. Обосновать, исходя из этого уравнения, требования, предъявляемые к волновой функции, – её непрерывность и непрерывность первой производной от волновой функции.

46.**8**. Может ли $|\psi(x)|^2$ быть больше единицы?

46.**9**. Показать, что для ψ-функции выполняется равенство $|\psi(x)|^2 = \psi(x)\psi^*(x)$, где $\psi^*(x)$ означает функцию, комплексно сопряженную $\psi(x)$.

46.**10**. Доказать, что если ψ-функция циклически зависит от времени, т.е. $\Psi(x,t) = \exp\left(-\frac{l}{\hbar}Et\right)\psi(x)$, то плотность вероятности есть функция только координаты.

Одномерный бесконечно глубокий потенциальный ящик

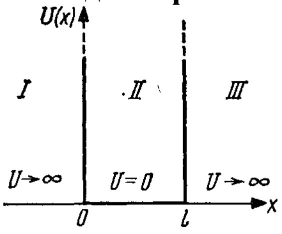

Рис. 8.9

46.**11**. Электрон находится в бесконечно глубоком прямоугольном одномерном потенциальном ящике шириной l (рис. 8.9). Написать уравнение Шредингера и его решение (в тригонометрической форме) для области *II* ($0<x<l$).

46.**12**. Известна волновая функция, описывающая состояние электрона в потенциальном ящике шириной l: $\psi(x) = C_1 \sin(kx) + C_2 \cos(kx)$. Используя граничные условия $\psi(0) = 0$ и $\psi(l) = 0$ определить коэффициент C_2 и возможные значения волнового вектора k, при котором существуют нетривиальные решения.

46.**13**. Электрону в потенциальном ящике шириной l отвечает волновое число $k = \frac{\pi n}{l}$ (здесь $n = 1, 2, 3, \ldots$). Используя связь энергии E электрона с волновым числом k, получить выражение для собственных значений энергии E_n.

46.**14**. Частица находится в потенциальном ящике. Найти отношение разности соседних энергетических уровней $\Delta E_{n+1,n}$ к энергии E_n частицы в трех случаях: 1) $n = 3$; 2) $n = 10$; 3) $n\to\infty$. Пояснить полученные результаты.

46.**15**. Электрон находится в потенциальном ящике шириной $l = 0{,}5$ нм. Определить наименьшую разность ΔE энергетических уровней электрона. Ответ выразить в электрон-вольтах.

46.**16**. Собственная функция, описывающая состояние частицы в потенциальном ящике, имеет вид $\psi_n(x) = C\sin\left(\frac{\pi n}{l}x\right)$. Используя условия нормировки, определить постоянную C.

46.17. Решение уравнения Шредингера для бесконечно глубокого одномерного прямоугольного потенциального ящика можно записать в виде $\psi(x) = C_1 e^{ikx} + C_2 e^{-ikx}$, где $k = \frac{\sqrt{mE}}{\hbar}$. Используя граничные условия и нормировку ψ-функции, определить: 1) коэффициенты C_1 и C_2; 2) собственные значения энергии E_n. Найти выражение для собственной нормированной ψ-функции.

46.18. Изобразить на графике вид первых трех собственных функций $\psi_n(x)$, описывающих состояние электрона в потенциальном ящике шириной l, а также вид $|\psi_n(x)|^2$. Установить соответствие между числом N узлов волновой функции (т.е. числом точек, где волновая функция обращается в нуль в интервале $0<x<l$) и квантовым числом n. Функцию считать нормированной на единицу.

46.19. Частица в потенциальном ящике шириной l находится в возбужденном состоянии ($n = 2$). Определить, в каких точках интервала ($0<x<l$) плотность вероятности $|\psi_2(x)|^2$ нахождения частицы максимальна и минимальна.

46.20. Электрон находится в потенциальном ящике шириной l. В каких точках в интервале $0<x<l$ плотность вероятности нахождения электрона на первом и втором энергетических уровнях одинакова? Вычислить плотность вероятности для этих точек. Решение пояснить графически.

46.21. Частица в потенциальном ящике находится в основном состоянии. Какова вероятность W нахождения частицы: 1) в средней трети ящика; 2) в крайней трети ящика?

46.22. В одномерном потенциальном ящике шириной l находится электрон. Вычислить вероятность W нахождения электрона на первом энергетическом уровне в интервале ¼, равноудаленном от стенок ящика.

46.23. Частица в потенциальном ящике шириной l находится в низшем возбужденном состоянии. Определить вероятность W нахождения частицы в интервале ¼, равноудаленном от стенок ящика.

46.24. Вычислить отношение вероятностей W_1/W_2 нахождения электрона на первом и втором энергетических уровнях в интервале ¼, равноудаленном от стенок одномерной потенциальной ямы шириной l.

46.25. Показать, что собственные функции $\psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{l}}\sin\left(\frac{\pi n}{l}x\right)$ и $\psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{l}}\sin\left(\frac{\pi m}{l}x\right)$, описывающие состояние частицы в потенциальном ящике, удовлетворяют условию ортогональности, т.е.

$$\int_2^1 \psi_n(x)\psi_m(x)dx=\begin{cases}1\ при\ n=m\\ 0\ при\ n\neq m\end{cases}.$$

46.26. Электрон находится в одномерном потенциальном ящике шириной l. Определить среднее значение координаты $\langle x\rangle$ электрона ($0<x<l$).

46.27. Используя выражение энергии $E_n=\frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{ml^2}$ частицы, находящейся в потенциальном ящике, получить приближенное выражение энергии: 1) гармонического осциллятора; 2) водородоподобного атома. Сравнить полученные результаты с истинными значениями энергий.

Двух- и трехмерный потенциальный ящик

46.28. Считая, что нуклоны в ядре находятся в трехмерном потенциальном ящике кубической нормы с линейными размерами l = 10 фм, оценить низший энергетический уровень нуклонов в ядре.

46.29. Определить из условия нормировки коэффициент C собственной ψ-функции $\psi_{n_1n_2}(x,y)=C\sin\left(\frac{\pi n_1}{l_1}x\right)\cdot\sin\left(\frac{\pi n_2}{l_2}y\right)$, описывающей состояние электрона в двухмерном бесконечно глубоком потенциальном ящике со сторонами l_1 и l_2.

46.30. Электрон находится в основном состоянии в двухмерном квадратном бесконечно глубоком потенциальном ящике со стороной l. Определить вероятность W нахождения электрона в области, ограниченной квадратом, который равноудален от стенок ящика и площадь которого составляет ¼ площади ящика.

46.31. Определить из условия нормировки коэффициент собственной ψ-функции

$$\psi_{n_1 n_2 n_3}(x, y, z) = C \sin\left(\frac{\pi n_1}{l_1} x\right) \cdot \sin\left(\frac{\pi n_2}{l_2} y\right) \cdot \sin\left(\frac{\pi n_3}{l_3} z\right),$$

описывающей состояние электрона в трехмерном потенциальном бесконечно глубоком ящике со сторонами l_1, l_2, l_3.

Низкий потенциальный барьер бесконечной ширины

46.32. Написать уравнение Шредингера для электрона с энергией E, движущегося в положительном направлении оси x для областей I и II (см. рис. 1), если на границе этих областей имеется низкий потенциальный барьер высотой U.

46.33. Написать решения уравнений Шредингера (см. предыдущую задачу) для областей I и II. Какой смысл имеют коэффициенты A_1 и B_1 для $\psi_1(x)$ и A_2 и B_2 для $\psi_{II}(x)$? Чему равен коэффициент B_2?

46.34. Зная решение уравнений Шредингера для областей I и II потенциального барьера $\psi_I(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}$, $\psi_{II}(x) = A_2 e^{ikx}$ определить из условий непрерывности ψ-функций и их первых производных на границе барьера отношение амплитуд вероятности B_1/A_1 и A_2/A_1.

46.35. Зная отношение амплитуд вероятности $\frac{A_1}{A_2} = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}$ для волны, отраженной от барьера, и $\frac{A_1}{A_2} = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}$ для проходящей волны, найти выражение для коэффициента отражения ρ и коэффициента прохождения τ.

46.36. Считая выражение для коэффициента отражения ρ от потенциального барьера и коэффициента прохождения τ известными, показать, что ρ + τ = 1.

46.37. Электрон с энергией E = 25 эВ встречает на своем пути потенциальный барьер высотой U = 9 эВ (см. рис. 1). Определить коэффициент преломления n волн де Бройля на границе барьера.

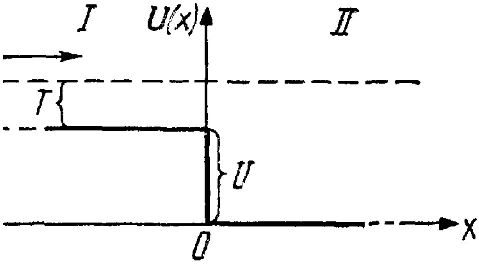

Рис. 8.10

46.38. Определить коэффициент преломления n волн де Бройля для протонов на границе потенциальной ступени (рис. 8.10). Кинетическая энергия протонов равна 16 эВ, а высота U потенциальной ступени равна 9 эВ.

46.39. Электрон обладает энергией $E = 10$ эВ. Определить, во сколько раз изменятся его скорость v, длина волны де Бройля λ и фазовая скорость при прохождении через потенциальный барьер (см. рис. 1) высотой $U = 6$ эВ.

46.40. Протон с энергией $E = 1$ МэВ изменил при прохождении потенциального барьера дебройлевскую длину волны на 1 %. Определить высоту U потенциального барьера.

46.41. На пути электрона с дебройлевской длиной волны $\lambda_1 = 0{,}1$ нм находится потенциальный барьер высотой $U = 120$ эВ. Определить длину волны де Бройля λ_2 после прохождения барьера.

46.42. Электрон с энергией $E = 100$ эВ попадает на потенциальный барьер высотой $U = 64$ эВ. Определить вероятность W того, что электрон отразится от барьера.

46.43. Найти приближенное выражение коэффициента отражения ρ от очень низкого потенциального барьера ($U \ll E$).

46.44. Коэффициент отражения ρ протона от потенциального барьера равен $2{,}5 \cdot 10^{-5}$. Определить, какой процент составляет высота U барьера от кинетической энергии T падающих на барьер протонов.

46.45. Вывести формулу, связывающую коэффициент преломления n волн де Бройля на границе низкого потенциального барьера и коэффициент отражения ρ от него.

46.46. Определить показатель преломления n волн де Бройля при прохождении частицей потенциального барьера с коэффициентом отражения $\rho = 0{,}5$.

46.47. При каком отношении высоты U потенциального барьера и энергии E электрона, падающего на барьер, коэффициент отражения $\rho = 0{,}5$?

46.48. Электрон с энергией $E = 10$ эВ падает на потенциальный барьер. Определить высоту U барьера, при которой показатель преломления n волн де Бройля и коэффициент отражения ρ численно совпадают.

46.49. Кинетическая энергия T электрона в два раза превышает высоту U потенциального барьера. Определить коэффициент отражения ρ и коэффициент прохождения τ электронов на границе барьера.

46.50. Коэффициент прохождения τ электронов через низкий потенциальный барьер равен коэффициенту отражения ρ. Определить, во сколько раз кинетическая энергия T электронов больше высоты U потенциального барьера.

46.51. Вывести формулу, связывающую коэффициент прохождения τ электронов через потенциальный барьер и коэффициент преломления n волн де Бройля.

46.52. Коэффициент прохождения τ протонов через потенциальный барьер равен 0,8. Определить показатель преломления n волн де Бройля на границе барьера.

46.53. Электрон с кинетической энергией T движется в положительном направлении оси x. Найти выражение для коэффициента отражения ρ и коэффициента прохождения τ на границе потенциальной ступени высотой U (рис. 5).

46.54. Найти приближенное выражение для коэффициента прохождения τ через низкий потенциальный барьер при условии, что кинетическая энергия T частицы в области II (см. рис. 1) много меньше высоты U потенциального барьера.

46.55. Вычислить коэффициент прохождения τ электрона с энергией $E = 100$ эВ через потенциальный барьер высотой $U = 99{,}75$ эВ.

46.56. Показать на частном примере низкого потенциального барьера сохранение полного числа частиц, т.е. что плотность потока N электронов, падающих на барьер, равна сумме плотности потока N_ρ электронов, отраженных от барьера, и плотности потока N_τ электронов, прошедших через барьер.

46.57. На низкий потенциальный барьер направлен моноэнергетический поток электронов с плотностью потока энергии $J_1 = 10$ Вт/м^2. Определить плотность потока энергии J_2 электронов, прошедших барьер, если высота его $U = 0{,}91$ эВ и энергия E электронов в падающем потоке равна 1 эВ.

46.58. Моноэнергетический поток электронов падает на низкий потенциальный барьер (см. рис. 1). Коэффициент прохождения $\tau = 0{,}9$. Определить отношение J_2/J_1 плотности потока энергии волны, прошедшей барьер, к плотности потока энергии волны, падающей на барьер.

46.59. На низкий потенциальный барьер падает моноэнергетический поток электронов. Концентрация n_0 электронов в падающем потоке равна 10^9 мм$^{-3}$, а их энергия $E = 100$ эВ. Определить давление, которое испытывает барьер, если его высота $U = 9{,}7$ эВ.

Высокий потенциальный барьер бесконечной ширины

Прим. Прямоугольный потенциальный барьер называется низким, если энергия E частицы больше высоты U потенциального барьера, в противном случае барьер называется высоким.

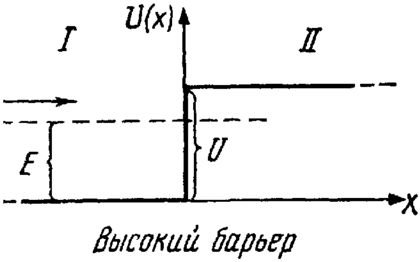

Рис. 8.11

46.60. Написать уравнение Шредингера и найти его решение для электрона, движущегося в положительном направлении оси x для областей I и II (рис. 8.11), если на границе этих областей имеется потенциальный барьер высотой U.

46.61. Для областей I и II высокого потенциального барьера (см. рис. 5) ψ-функции имеют вид $\psi_I(x) = A_1 e^{ik_1x} + B_1 e^{-ik_1x}$, $\psi_{II}(x) = A_2 e^{-kx}$. Используя непрерывность ψ-функций и их первых производных на границе барьера, найти отношение амплитуд A_2/A_1.

46.62. Написать выражение для $\psi_{II}(x)$ в области II (рис. 6) высокого потенциального барьера, если ψ-функция нормирована так, что $A_1 = 1$.

46.63. Амплитуда A_2 волны в области II высокого потенциального барьера (рис. 6) равна $\dfrac{2k_1}{k_1 + ik}$; $k_1 = \dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$; $k = \dfrac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar}$.

Установить выражение для плотности вероятности нахождения частицы в области II ($x>0$), если энергия частицы равна E, а высота потенциального барьера равна U.

46.64. Используя выражение для коэффициента отражения от низкой ступени $\rho = \left|\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right|^2$, где k_1 и k_2 – волновые числа, найти выражение коэффициента отражения от высокой ступени ($T<U$).

46.65. Показать, что имеет место полное отражение электронов от высокого потенциального барьера, если коэффициент отражения может быть записан в виде $\rho = \left|\frac{k_1 - ik}{k_1 + ik}\right|^2$.

46.66. Определить плотность, вероятности $|\psi_{II}(0)|^2$ нахождения электрона в области *II* высокого потенциального барьера в точке $x = 0$, если энергия электрона равна E, высота потенциального барьера равна U и ψ-функция нормирована так, что $A_1 = 1$.

Прямоугольный потенциальный барьер конечной ширины

46.67. Написать уравнения Шредингера для частицы с энергией E, движущейся в положительном направлении оси x для областей *I*, *II* и *III* (см. рис. 3), если на границах этих областей имеется прямоугольный потенциальный барьер высотой U и шириной d.

46.68. Написать решения уравнений Шредингера (см. предыдущую задачу) для областей *I*, *II* и *III*, пренебрегая волнами, отраженными от границ *I–II* и *II–III*, и найти коэффициент прозрачности D барьера.

46.69. Найти вероятность W прохождения электрона через прямоугольный потенциальный барьер при разности энергий $U - E = 1$ эВ, если ширина барьера: 1) $d = 0{,}1$ нм; 2) $d = 0{,}5$ нм.

46.70. Электрон проходит через прямоугольный потенциальный барьер шириной $d = 0{,}5$ нм. Высота U барьера больше энергии E электрона на 1 %. Вычислить коэффициент прозрачности D, если энергия электрона: 1) $E = 10$ эВ; 2) $E = 100$ эВ.

46.71. Ширина d прямоугольного потенциального барьера равна 0,2 нм. Разность энергий $U - E = 1$ эВ. Во сколько раз изменится вероятность W прохождения электрона через барьер, если разность энергий возрастет в $n = 10$ раз?

46.72. Электрон с энергией $E = 9$ эВ движется в положительном направлении оси x. При какой ширине d потенциального барьера коэффициент прозрачности $D = 0{,}1$, если высота U барьера равна 10 эВ? Изобразите на рисунке примерный вид волновой функции (ее действительную часть) в пределах каждой из областей *I*, *II*, *III* (см. рис. 3).

46.73. При какой ширине d прямоугольного потенциального барьера коэффициент прозрачности D для электронов равен 0,01? Разность энергий $U - E = 10$ эВ.

46.74. Электрон с энергией E движется в положительном направлении оси x. При каком значении $U - E$, выраженном в электрон-вольтах, коэффициент прозрачности $D = 10^{-3}$, если ширина d барьера равна 0,1 нм?

46.75. Электрон с энергией $E = 9$ эВ движется в положительном направлении оси x. Оценить вероятность W того, что электрон пройдет через потенциальный барьер, если его высота $U = 10$ эВ и ширина $d = 0{,}1$ нм.

8.2.3. Строение атома

Основные формулы

• Уравнение Шредингера для стационарных состояний в сферических координатах

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2}\left[\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\frac{\partial\psi}{\partial\vartheta}\right)+\frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\vartheta^2}\right]+\frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\psi=0,$$

где $\psi = \psi(r,\vartheta,\varphi)$ – волновая функция;

E – полная энергия частицы;

U – потенциальная энергия частицы (являющаяся функцией координат).

• В атоме водорода (или водородоподобном ионе) потенциальная энергия $U(r)$ имеет вид

$$U(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r},$$

где Z – зарядовое число;

e – элементарный заряд;

ε_0 – электрическая постоянная.

• Собственное значение энергии E_n электрона в атоме водорода

$$E_n = -\frac{Z^2e^4m}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2n^2},$$

где $\hbar$ – постоянная Планка;

n – главное квантовое число, $n = 1, 2, 3, \ldots$

• Символическая запись ψ-функции, описывающей состояние электрона в атоме водорода,

$\psi_{n,l,m}(r,\vartheta,\varphi)$,

где n, l, m – квантовые числа соответственно главное, орбитальное, магнитное.

Вероятность dW того, что электрон находится в области, ограниченной элементом объема dV, взятого в окрестности точки с координатами r, ϑ, φ,

$$dW = \left|\psi_{n,l,m}(r,\vartheta,\varphi)\right|^2 dV,$$

где $dV = r^2 \sin\vartheta d\vartheta d\varphi dr$ (в сферических координатах).

В s-состоянии ($l = 0$, $m = 0$) волновая функция сферически-симметричная (т. е. не зависит от углов ϑ и φ). Нормированные собственные ψ-функции, отвечающие s-состоянию (основному) и $2s$-состоянию,

$$\psi_{100}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a} \quad \text{и} \quad \psi_{200}(r) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi a^3}}\left(2 - \frac{r}{a}\right) e^{-r/(2a)}$$

или в атомных единицах

$$\psi_{100}(\rho) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-\rho} \quad \text{и} \quad \psi_{200}(\rho) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}(2-\rho)e^{-\rho/2}$$

где в качестве единицы длины принят боровский радиус

$a = \dfrac{4\pi\varepsilon_0\hbar}{e^2 m} = 52{,}9$ пм. При таком выборе единицы длины расстояние от ядра $\rho = r/a$ будет выражаться в безразмерных единицах длины, называемых атомными единицами.

Вероятность dW найти электрон в атоме водорода, находящемся в s-состоянии, в интервале (r, $r+dr$) одинакова по всем направлениям и определяется формулой

$\mathrm{d}W = |\psi_{n,0,0}(r)|^2\, 4\pi r^2 dr.$

• Орбитальные момент импульса и магнитный момент электрона:

$$\Im_l = \hbar\sqrt{l(l+1};$$

$$\mu_l = \mu_b\sqrt{l(l+1)},$$

где l – орбитальное квантовое число, которое может принимать значения 0, 1, 2, …, (n – 1);

μ_b – магнетон Бора,

$$\mu_b = \frac{e\hbar}{2m} = 0{,}927 \cdot 10^{-23} \text{ Дж/Тл.}$$

• Проекции орбитальных момента импульса и магнитного момента на направление внешнего магнитного поля (совпадающего с осью Z):

$$\Im_{l,z} = \hbar m_l;$$

$$\mu_{l,z} = \mu_b m_l.$$

• Гиромагнитное отношение для орбитальных магнитного и механического моментов

$$\frac{\mu_l}{\Im_l} = \frac{\mu_{l,z}}{\Im_{l,z}} = \frac{\mu_B}{\hbar} = \frac{1}{2}\frac{e}{m}.$$

• Спин и спиновый магнитный момент электрона:

$$\Im_s = \hbar\sqrt{s(s+1)};$$

$$\mu_s = 2\mu_B\sqrt{s(s+1)},$$

где s – спиновое квантовое число ($s = ½$).

Спином называется собственный момент импульса электрона и других элементарных частиц. Спин не связан с перемещением частицы как целого и имеет квантовую природу. Спин выражается в единицах постоянной Планка $\hbar$.

• Проекции спиновых момента импульса и магнитного момента на направление внешнего магнитного поля (совпадающего с осью Z):

$$\Im_{s,z} = \hbar m_s;$$

$$\mu_{s,z} = 2\mu_B m_s,$$

где m_s – спиновое магнитное квантовое число ($m_s = -^1/_2, +^1/_2$). Гиромагнитное отношение для спиновых магнитного и механического моментов

$$\frac{\mu_s}{\Im_s} = \frac{\mu_{s,z}}{\Im_{s,z}} = 2\frac{\mu_B}{\hbar} = \frac{e}{m}.$$

• Распределение электронов по состояниям в атоме записывается с помощью спектроскопических символов:

Значение побочного квантового числа	0	1	2	3	4	5	6	7
Спектроскопический символ	*s*	*p*	*d*	*f*	*g*	*h*	*i*	*k*

Электронная конфигурация записывается следующим образом: число, стоящее слева перед спектроскопическим символом, означает главное квантовое число n, а сам спектроскопический символ отвечает тому или иному значению орбитального квантового числа l (например, обозначению $2p$ отвечает электрон с $n = 2$ и $l = 1$; $2p^2$ означает, что таких электронов в атоме 2, и т.д.).

• Принцип Паули. В атоме не может находиться два (и более) электрона, характеризуемых одинаковым набором четырех квантовых чисел: n, l, m_l, m_s.

• Полный момент импульса электрона

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

где j – внутреннее квантовое число ($j = l+½$, $l–½$).

• Полный орбитальный момент атома

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

где L – полное орбитальное квантовое число.

• Полный спиновый момент атома

$$\Im_S = \hbar\sqrt{S(S+1)},$$

где S – полное спиновое квантовое число.

• Полный момент импульса атома

$$\Im_J = \hbar\sqrt{J(J+1)},$$

где J – полное внутреннее квантовое число.

• Символическое обозначение состояния атома (спектральный терм)

$$^{2S+1}L_J,$$

где $2S + 1$ – мультиплетность.

Вместо полного орбитального квантового числа L пишут символ в соответствии с таблицей:

Значение	0	1	2	3	4	5
Символ	S	P	D	F	G	$И$

Пример. Терм $^2P_{3/2}$ расшифровывается следующим образом: мультиплетность $2S + 1 = 2$; следовательно, $S = 1/2$, символу P соответствует $L = 1$, а $J = 3/2$.

• Магнитный момент атома

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

где g – множитель (или фактор) Ланде,

$$g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}.$$

• Проекция магнитного момента атома на направление внешнего магнитного поля (совпадающего с осью Z)

$$\mu_{\mathrm{J,z}} = g\mu_{\mathrm{B}} m_J ,$$

где m_J – полное магнитное квантовое число ($m_J = J, J–1, \ldots, –J$).

• Сила, действующая на атом в неоднородном магнитном поле,

$$F_z = \frac{\partial B}{\partial z}\mu_{\mathrm{J,z}} ,$$

где $\frac{\partial B}{\partial z}$ – градиент магнитной индукции.

• Частота ларморовой прецессии

$$\omega_{Л} = \frac{eB}{2m},$$

где m – масса электрона.

• Энергия атома в магнитном поле

$E = –\mu_{J,z}B$.

• Величина расщепления спектральной линии при эффекте Зеемана:

а) сложном (аномальном)

$$\Delta\omega = (m_J'' g'' - m_J' g')\omega_{Л} ,$$

где m_J'', m_J' и g'', g' – магнитные квантовые числа и множители Ланде соответствующих термов;

б) простом (нормальном)

$\Delta\omega = 0$;

$\pm\omega_{Л}$.

• Правила отбора для квантовых чисел S, L, J и m_S, m_L, m_J:

$\Delta S = 0$; $\Delta m_S = 0$;

$\Delta L = \pm 1$; $\Delta m_L = 0, \pm 1$;

$\Delta J = 0, \pm 1$; $\Delta m_J = 0, \pm 1$.

Не осуществляются переходы $J = 0 \rightarrow J = 0$, а при $J = 0$ – переходы $m_J = 0 \rightarrow m_J = 0$.

8.2.3.1. Примеры решения задач

Пример 1. Атом водорода находится в состоянии 1_S. Определить вероятность W пребывания электрона в атоме внутри сферы радиусом $r = 0{,}1\cdot a$ (где a – радиус первой боровской орбиты). Волновая функция, описывающая это состояние, считается известной.

Решение. Вероятность обнаружить электрон в окрестности точки с координатами r, ϑ, φ в объеме dV определяется равенством

$$dW = \left|\psi_{n,l,m}(r,\vartheta,\varphi)\right|^2 dV .$$

В $1s$-состоянии волновая функция ψ сферически симметрична, т.е. зависит только от r, и поэтому

$$dW = \left|\psi_{100}(r)\right|^2 dV , \qquad (1)$$

где $\psi_{100}(r)$ – собственная нормированная волновая функция, отвечающая основному состоянию: $\psi_{100}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-\frac{r}{a}}$.

Благодаря сферической симметрии ψ-функции вероятность обнаружить электрон на расстоянии r одинакова по всем направлениям. Поэтому элемент объема dV, отвечающий одинаковой плотности вероятности, можно представить в виде объема сферического слоя радиусом r и толщиной dr: $dV = 4\pi r^2 dr$.

С учетом выражений $\psi_{100}(r)$ и dV формула (1) запишется в виде

$$dW = \left|\frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}\right|^2 4\pi r^2 dr = \frac{4}{a^3} e^{-2r/a} r^2 dr .$$

При вычислении вероятности удобно перейти к атомным единицам, приняв в качестве единицы длины радиус первой боровской орбиты a. Если ввести безразмерную величину $\rho = r/a$, то

$r^2 = \rho^2 a^2$, $dr = a d\rho$, $dW = 4e^{-2\rho}\rho^2 dr$.

Вероятность найдем, интегрируя dW в пределах от $r_1 = 0$ до $r_2 = 0{,}1a$ (или от $\rho_1 = 0$ до $\rho_2 = 0{,}1$):

$$W = 4\int_0^{0,1} \rho^2 e^{-2\rho} d\rho .$$

Этот интеграл может быть точно вычислен интегрированием по частям, однако при малых ρ ($\rho_{max} = 0{,}1$) выражение $e^{-2\rho}$ можно разложить в ряд Маклорена:

$$e^{-2\rho} = 1 - 2\rho + \frac{1}{2!}(2\rho)^2 - \ldots$$

и произвести приближенное вычисление.

Пренебрегая всеми членами степени выше первой, запишем интеграл в виде

$$W = 4\int_0^{0,1}(1-2\rho)\rho^2 d\rho = 4\int_0^{0,1}\rho^2 d\rho - 8\int_0^{0,1}\rho^3 d\rho$$

Первый и второй интегралы дают соответственно результаты

$$4\left[\frac{\rho^3}{3}\right]_0^{0,1} = \frac{4}{3}\cdot 10^{-3} \quad \text{и} \quad 8\left[\frac{\rho^4}{4}\right]_0^{0,1} = 0,2\cdot 10^{-3}.$$

Таким образом, искомая вероятность

$W = 1,33\cdot10^{-3} - 0,2\cdot10^{-3} = 1,13\cdot10^{-3}$.

Пример 2. Электрон в возбужденном атоме водорода находится в $3p$-состоянии. Определить изменение магнитного момента, обусловленного орбитальным движением электрона, при переходе атома в основное состояние.

Решение. Изменение $\Delta\mu_l$ магнитного момента найдем как разность магнитных моментов в конечном (основном) и начальном (возбужденном) состояниях, т.е.

$\Delta\mu_l = \mu_{l2} - \mu_{l1}$. Магнитный момент орбитального движения электрона зависит только от орбитального квантового числа l

$$\mu_1 = \mu_B\sqrt{l(l+1)}\ .$$

Отсюда имеем: в основном состоянии $l = 0$ и $\mu_{l2} = 0$; в возбужденном ($3p$) состоянии $l = 1$ и $l = 1$ и $\mu = -\mu_B\sqrt{2}$. Следовательно, изменение магнитного момента

$$\Delta\mu_1 = -\mu_B\sqrt{2}\ .$$

Знак минус показывает, что в данном случае магнитный момент уменьшился. Подставив значение $\mu_B = 0,927\cdot10^{-23}$ Дж/Тл, получим

$\Delta\mu_l = -1,31\cdot10^{-23}$ Дж/Тл.

8.2.3.2. Вопросы и задачи для самостоятельного решения

Атом водорода

47.1. Уравнение Шредингера в сферической системе координат для электрона, находящегося в водородоподобном атоме, имеет вид

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2}\left\{\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial\psi}{\partial\vartheta}\right)+\frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{d^2\psi}{d\vartheta^2}\right\}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E+\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)\psi=0$$

Показать, что это уравнение разделяется на два, если волновую функцию представить в виде произведения двух функций:

$$\psi(r,\vartheta,\psi)=R(r)Y(\vartheta,\varphi),$$

где $R(r)$ – радиальная и $Y(\vartheta,\varphi)$ – угловая функции.

47.2. Уравнение для радиальной $R(r)$ функции, описывающей состояние электрона в атоме водорода, имеет вид

$$\frac{d^2R}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR}{dr}+\left[\alpha+\frac{2\beta}{r}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]R=0,$$

где α, β и l – некоторые параметры.

Используя подстановку $\chi(r) = rR(r)$ преобразовать его к виду

$$\frac{d^2\chi}{dr^2}+\left[\alpha+\frac{2\beta}{r}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]\chi=0.$$

47.3. Уравнение для радиальной функции $\chi(r)$ может быть преобразовано к виду

$$\frac{d^2\chi}{dr^2}+\left[\alpha+\frac{2\beta}{r}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]\chi(r)=0,$$

где $\alpha=\dfrac{2mE}{\hbar^2}$; $\beta=\dfrac{Ze^2m}{(4\pi\varepsilon_0\hbar)^2}$;

l – целое число.

Найти асимптотические решения уравнения при больших числах r. Указать, какие решения с $E>0$ или с $E<0$ приводят к связанным состояниям.

47.4. Найти по данным предыдущей задачи асимптотическое решение уравнения при малых r.

Прим. Считать при малых r члены α и $2\beta/r$ малыми по сравнению с $l(l+1)/r^2$. Применить подстановку $\chi(r) = \mathrm{r}^{\gamma}$.

47.5. Найти решение уравнения для радиальной функции $R(r)$, описывающей основное состояние ($l = 0$), и определить энергию электрона в этом состоянии. Исходное уравнение для радиальной функции может быть записано в виде

$$\frac{d^2R}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR}{dr}+\left[\alpha+2\frac{\beta}{r}-\frac{l(l+1}{r^2}\right]R=0,$$

где $\alpha = \dfrac{2mE}{\hbar^2}$; $\beta = \dfrac{Ze^2 m}{(4\pi\varepsilon_0\hbar)^2}$;

l – орбитальное квантовое число.

Прим. Применить подстановку $R(r) = e^{-\gamma r}$.

47.6. Атом водорода находится в основном состоянии. Собственная волновая функция, описывающая состояние электрона в атоме, имеет вид $\psi(r) = Ce^{-r/a}$, где C – некоторая постоянная. Найти из условия нормировки постоянную C.

47.7. Собственная функция, описывающая основное состояние электрона в атоме водорода, имеет вид $\psi(r) = Ce^{-r/a}$, где $\alpha = \dfrac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{e^2 m}$ (боровский радиус). Определить расстояние r, на котором вероятность нахождения электрона максимальна.

47.8. Электрон в атоме водорода описывается в основном состоянии волновой функцией $\psi(r) = Ce^{-r/a}$. Определить отношение вероятностей ω_1/ω_2 пребывания электрона в сферических слоях толщиной $\Delta r = 0{,}01a$ и радиусами $r_1 = 0{,}5a$ и $r_2 = 1{,}5a$.

47.9. Атом водорода находится в основном состоянии. Вычислить: 1) вероятность ω_1 того, что электрон находится внутри области, ограниченной сферой радиуса, равного боровскому радиусу a; 2) вероятность ω_2 того, что электрон находится вне этой области; 3) отношение вероятностей ω_2/ω_1. Волновую функцию считать известной:

$$\psi_{100}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-\frac{r}{a}}.$$

47.10. Зная, что нормированная собственная волновая функция, описывающая основное состояние электрона в атоме водорода, имеет вид $\psi(r) = \dfrac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{\frac{-r}{a}}$, найти среднее расстояние $\langle r \rangle$ электрона от ядра.

47.11. Принято электронное облако (орбиталь) графически изображать контуром, ограничивающим область, в которой вероятность обнаружения электрона составляет 0,9. Вычислить в атомных единицах радиус орбитали для *ls*-состояния электрона в атоме водорода. Волновая функция, отвечающая этому состоянию,

$\psi_{100}(\rho) = \frac{e^{-\rho}}{\sqrt{\pi}}$, где ρ – расстояние электрона от ядра, выраженное в атомных единицах.

Прим. Получающееся трансцендентное уравнение решить графически.

47.12. Волновая функция, описывающая 2*s*-состояние электрона в атоме водорода, имеет вид $\psi_{200}(\rho) = \frac{(2-\rho)e^{\frac{-\rho}{2}}}{4\sqrt{2\pi}}$, где ρ – расстояние электрона от ядра, выраженное в атомных единицах. Определить: 1) расстояние ρ_1 от ядра, на которых вероятность обнаружить электрон имеет максимум; 2) расстояния ρ_2 от ядра, на которых вероятность нахождения электрона равна нулю; 3) построить графики зависимости $|\psi_{200}(\rho)|^2$ от ρ и $\rho^2|\psi_{200}(\rho)|^2$ от ρ.

47.13. Уравнение для угловой функции $Y(\vartheta,\varphi)$ в сферической системе координат может быть записано в виде

$$\frac{1}{Y}\left\{\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial Y}{\partial\vartheta}\right)+\frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\vartheta^2}\right\} = -\lambda,$$

где λ – некоторая постоянная.

Показать, что это уравнение можно разделить на два, если угловую функцию представить в виде произведения двух функций: $Y(\vartheta,\varphi) = \Theta(\vartheta)\Phi(\varphi)$, где $\Theta(\vartheta)$ – функция, зависящая только от угла ϑ; $\Phi(\varphi)$ – то же, только от угла φ.

47.14. Угловая функция $\Phi(\varphi)$ удовлетворяет уравнению $\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} + m\Phi = 0$. Решить уравнение и указать значения параметра *m*, при которых уравнение имеет **решение**.

47.15. Зависящая от угла φ угловая функция имеет вид $\Phi(\varphi) = Ce^{im\varphi}$. Используя условие нормировки, определить постоянную *C*.

47.16. Изобразить графически угловое распределение плотности вероятности нахождения электрона в атоме водорода, если угловая функция $Y_{l,m}(\vartheta,\varphi)$ имеет вид: 1) в *s*-состоянии ($l = 0$) $Y_{0,0}\frac{1}{\sqrt{\pi}}$; 2) в *p*-состоянии ($l = 1$) при трех значениях *m*: а) $m = 1$,

$Y_{1,1} = \frac{\sqrt{3}}{8\pi \sin(\vartheta e^{i\phi})}$; б) $m = 0$, $Y_{1,0} = \frac{\sqrt{3}}{4\pi \cos(\vartheta)}$, в) $m = -1$, $Y_{1,-1} \frac{\sqrt{3}}{8\pi \sin(\vartheta e^{-i\phi})}$. Для построений воспользоваться полярной системой координат.

47.17. Угловое распределение плотности вероятности нахождения электрона в атоме водорода определяется видом угловой функции $Y_{l,m}(\vartheta, m)$. Показать, что p-подоболочка имеет сферически симметричное распределение плотности вероятности. Воспользоваться данными предыдущей задачи.

Орбитальный момент импульса и магнитный момент электрона

47.18. Вычислить момент импульса $\Im_l$ орбитального движения электрона, находящегося в атоме: 1) в s-состоянии; 2) в p-состоянии.

47.19. Определить возможные значения проекции момента импульса $\Im_{lz}$ орбитального движения электрона в атоме на направление внешнего магнитного поля. Электрон находится в d-состоянии.

47.20. Атом водорода, находившийся первоначально в основном состоянии, поглотил квант света с энергией $\varepsilon = 10{,}2$ эВ. Определить изменение момента импульса $\Delta\Im_l$ орбитального движения электрона. В возбужденном атоме электрон находится в p-состоянии.

47.21. Используя векторную модель атома, определить наименьший угол α, который может образовать вектор $\Im_l$ момента импульса орбитального движения электрона в атоме с направлением внешнего магнитного поля. Электрон в атоме находится в d-состоянии.

47.22. Электрон в атоме находится в f-состоянии. Найти орбитальный момент импульса $\Im_l$ электрона и максимальное значение проекции момента импульса $\Im_{lz\max}$ направление внешнего магнитного поля.

47.23. Момент импульса $\Im_l$ орбитального движения электрона в атоме водорода равен $1{,}83 \cdot 10^{-34}$ Дж·с. Определить магнитный момент μl, обусловленный орбитальным движением электрона.

47.24. Вычислить полную энергию E, орбитальный момент импульса $\mathfrak{I}_l$ и магнитный момент μl электрона, находящегося в $2p$-состоянии в атоме водорода.

47.25. Может ли вектор магнитного момента μ_l орбитального движения электрона установиться строго вдоль линий магнитной индукции?

47.26. Определить возможные значения магнитного момента μ_l, обусловленного орбитальным движением электрона в возбужденном атоме водорода, если энергия ε возбуждения равна 12,09 эВ.

Спиновый момент импульса и магнитный момент электрона

47.27. Вычислить спиновый момент импульса $\mathfrak{I}_s$ электрона и проекцию $\mathfrak{I}_{sz}$ этого момента на направление внешнего магнитного поля.

47.28. Вычислить спиновый магнитный момент μ_s электрона и проекцию магнитного момента μ_{sz} на направление внешнего поля.

47.29. Почему для обнаружения спина электрона в опытах Штерна и Герлаха используют пучки атомов, принадлежащих первой группе периодической системы, причем в основном состоянии?

47.30. Атомы серебра, обладающие скоростью $v = 0{,}6$ км/с, пропускаются через узкую щель и направляются перпендикулярно линиям индукции неоднородного магнитного поля (опыт Штерна и Герлаха). В поле протяженностью $l = 6$ см пучок расщепляется на два. Определить степень неоднородности $\partial B/\partial z$ магнитного поля, при которой расстояние b между компонентами расщепленного пучка по выходе его из поля равно 3 мм. Атомы серебра находятся в основном состоянии.

47.31. Узкий пучок атомарного водорода пропускается в опыте Штерна и Герлаха через поперечное неоднородное ($\partial B/\partial z = 2$ кТл/м) магнитное поле протяженностью $l = 8$ см. Скорость v атомов водорода равна 4 км/с. Определить расстояние b между компонентами расщепленного пучка атомов по выходе его из магнитного поля. Все атомы водорода в пучке находятся в основном состоянии.

47.32. В опыте Штерна и Герлаха узкий пучок атомов цезия (в основном состоянии) проходит через поперечное неоднородное магнитное поле и попадает на экран Э (рис. 8.12).

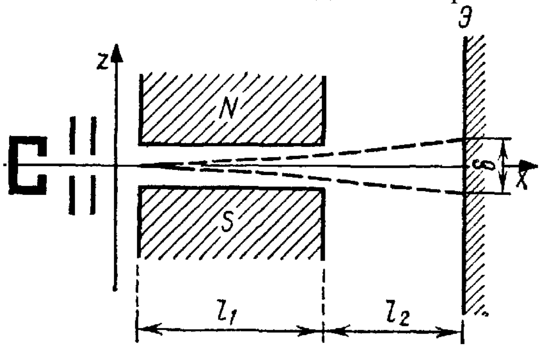

Рис. 8.12

Какова должна быть степень неоднородности $\partial B/\partial z$ магнитного поля, чтобы расстояние b между компонентами расщепленного пучка на экране было равно 6 мм? Принять $l_1 = l_2 = 10$ см. Скорость атомов цезия равна 0,3 км/с.

47.33. Узкий пучок атомов рубидия (в основном состоянии) пропускается через поперечное неоднородное магнитное поле протяженностью $l = 10$ см (рис. 1). На экране Э, отстоящем на расстоянии $l_2 = 20$ см от магнита, наблюдается расщепление пучка на два. Определить силу F_z, действующую на атомы рубидия, если расстояние b между компонентами пучка на экране равно 4 мм и скорость v атомов равна 0,5 км/с.

47.34. Узкий пучок атомов серебра при прохождении неоднородного ($\partial B/\partial z = 1$ кТл/м) магнитного поля протяженностью $l_1 = 4$ см расщепился на два пучка. Экран для наблюдения удален от границы магнитного поля на расстояние $l_2 = 10$ см (рис. 1). Определить (в магнетонах Бора) проекции $\mu_{J,r}$ магнитного момента атома на направление вектора магнитной индукции, если расстояние b между компонентами расщепленного пучка на экране равно 2 мм и атомы серебра обладают скоростью $v = 0,5$ км/с.

Застройка электронных оболочек

47.35. Какое максимальное число s-, p- и d-электронов может находиться в электронных K-, L- и M- слоях атома?

47.36. Используя принцип Паули, указать, какое максимальное число $N_{\max}$ электронов в атоме могут иметь одинаковыми следующие квантовые числа: 1) n, l, m, m_s', 2) n, l, m; 3) n, l; 4) n.

47.37. Заполненный электронный слой характеризуется квантовым числом $n = 3$. Указать число N электронов в этом слое, которые имеют одинаковые следующие квантовые числа: 1) $m_s = +1/2$; 2) $m = 2$; 3) $m_{s-} = -½$ и $m = 0$; 4) $m_s = +½$ и $l = 2$.

47.38. Найти число N электронов в атомах, у которых в основном состоянии заполнены: 1) K- и L- слои, $3s$-оболочка и наполовину $3p$-оболочка; 2) K,-, L- и M-слои и $4s$-, $4p$- и $4d$-оболочки. Что это за атомы?

47.39. Написать формулы электронного строения атомов: 1) бора; 2) углерода; 3) натрия.

Векторная модель атома. Спектральные термы

47.40. Как можно согласовать использование векторной модели атома с соотношением неопределенностей для проекций момента импульса?

47.41. Электрон в атоме водорода находится в p-состоянии. Определить возможные значения квантового числа j и возможные значения (в единицах $\hbar$) полного момента импульса $\Im j$, электрона. Построить соответствующие векторные диаграммы.

47.42. В возбужденном атоме гелия один из электронов находится в p-состоянии, другой в d-состоянии. Найти возможные значения полного орбитального квантового числа L и соответствующего ему момента импульса $\Im_L$. (в единицах $\hbar$). Построить соответствующие векторные диаграммы.

47.43. Определить угол φ между орбитальными моментами импульсов двух электронов, один из которых находится в d-состоянии, другой – в f-состоянии, при следующих условиях: 1) полное орбитальное квантовое число $L = 3$; 2) искомый угол – максимальный; 3) искомый угол – минимальный.

47.44. Система из трех электронов, орбитальные квантовые числа l_1, l_2, l_3 которых соответственно равны 1, 2, 3, находятся в s-состоянии. Найти угол $\varphi_{1,2}$ между орбитальными моментами импульса первых двух электронов.

47.45. Каковы возможные значения полного момента импульса $\Im_j$ электрона, находящегося в d-состоянии? Чему равны при этом углы φ между спиновым моментом импульса и орбитальным?

47.46. Спиновый момент импульса двухэлектронной системы определяется квантовым числом $S = 1$. Найти угол φ между спиновыми моментами импульса обоих электронов.

47.47. Система, состоящая из двух электронов, находится в состоянии с $L = 2$. Определить возможные значения угла φ между орбитальным моментом импульса p-электрона и полным орбитальным моментом импульса $\Im_J$ системы.

47.48. Найти возможные значения угла между спиновым моментом импульса и полным моментом: 1) одноэлектронной системы, состоящей из d-электрона; 2) двухэлектронной системы с $J = 2$.

47.49. Определить возможные значения (в единицах $\hbar$) проекции $\Im_{sz}$ спинового момента импульса электронной системы, находящейся в состоянии $^3D_3$, на направление полного момента.

47.50. Определить возможные значения квантового числа J электронной системы, для которой: 1) $S = 2$ и $L = 1$; 2) $S = 1$ и $L = 3$. Найти (в единицах $\hbar$) возможные значения полного момента импульса $\Im_j$ системы и построить соответствующие векторные диаграммы.

47.51. Определить возможные значения квантового числа J, соответствующего полному моменту импульса $\Im_s$ электронной системы, у которой $L = 3$, а S принимает следующие значения: 1) 3/2; 2) 2; 3) 5/2; 4) 4. Построить соответствующие векторные диаграммы.

47.52. Записать основные термы для следующих атомов: 1) H; 2) He; 3) Be; 4) Li; 5) B.

47.53. Перечислить возможные термы для следующих состояний атомов: 1) ^2S; 2) ^2P; 3) ^4P; 4) ^5D.

47.54. Определить кратности вырождения следующих термов: 1) $^2D_{3/2}$; 2) $^3F_2$ 3) ^1F.

47.55. Объяснить на основе векторной модели атома наличие двух систем термов (синглетных и триплетных) в атомах с двумя валентными электронами.

47.56. Определить возможные мультиплетности $(2S + 1)$ термов следующих атомов: 1) Li; 2) Be; 3) B; 4) C; 5) N.

47.57. Выписать все возможные термы для комбинации p- и d-электронов по типу связи Рассель-Саундерса. Дать их спектральные обозначения.

Магнитный момент атома. Атом в магнитном поле

47.58. Вычислить множитель Ланде g для атомов с одним валентным электроном в состояниях S и P.

47.59. Вычислить множитель Ланде g для атомов, находящихся в синглетных состояниях.

47.60. Определить магнитный момент μ_J атома в состоянии ^1D.

Ответ выразить в магнетонах Бора (μ_B).

47.61. Вычислить магнитный момент μ_J атома в состоянии $^3P_2$. Ответ выразить в магнетонах Бора.

47.62. Атом находится в состоянии $^2D_{3/2}$. Найти число возможных проекций магнитного момента на направление внешнего поля и вычислить (в магнетонах Бора) максимальную проекцию $\mu_{Jz\max}$.

47.63. Вычислить в магнетонах Бора магнитный момент μ_J атома водорода в основном состоянии.

47.64. Атом находится в состоянии $1/F$. Найти соответствующий магнитный момент μ_{Jz} и возможные значения его проекции μ_{Jz} на направление внешнего магнитного поля.

47.65. Максимальная проекция $\mu_{J,z\max}$ магнитного момента атома, находящегося в состоянии ^2D, составляет четыре магнетона Бора. Определить мультиплетность $(2S + 1)$ соответствующего терма.

47.66. На сколько составляющих расщепляется в опыте Штерна и Герлаха пучок атомов, находящихся в состояниях: 1) $^2P_{3/2}$, 2) ^1D; 3) $^5F_1$.

47.67. Определить максимальные проекции $\mu_{J,z\max}$ магнитных моментов атомов ванадия (^4F), марганца (^6S) и железа (^5D), если известно, что пучки этих атомов при прохождении через сильно неоднородное магнитное поле по методу Штерна и Герлаха расщепляются соответственно на 4, 6 и 9 составляющих. В скобках указаны состояния, в которых находятся атомы.

47.68. Вычислить частоты $\omega_Л$ ларморовой прецессии электронных оболочек атомов: 1) в магнитном поле Земли ($B = 5 \cdot 10^{-5}$ Тл); 2) в поле, магнитная индукция B которого равна 50 Тл.

Эффект Зеемана

47.71. Какое магнитное поле в случае эффекта Зеемана следует считать: 1) «слабым», 2) «сильным»?

47.72. Состояния атома характеризуются двумя спектральными термами. Указать квантовые числа S, L и возможные значения квантового числа J для состояний: 1) ^1S и ^1P; 2) ^1S и ^1F. Изобразить для этих состояний схему энергетических уровней при отсутствии магнитного поля.

47.73. Состояние атома характеризуется двумя спектральными термами. Указать возможные значения квантового числа J для состояний: 1) ^2S и ^2P; 2) ^3P и ^2D 3) ^3S и ^3D. Изобразить для этих состояний схему энергетических уровней с учетом спин-орбитального взаимодействия (естественного мультиплетного расщепления) при отсутствии магнитного поля.

8.2.4. Спектры молекул

Основные формулы

• Приведенная масса двухатомной молекулы

$\mu = m_1 m_2 (m + m_2)$,

где m_1 и m_2 – массы атомов, входящих в состав молекулы.

• Собственная круговая частота осциллятора

$$\omega = \sqrt{\frac{\beta}{\mu}},$$

где β – коэффициент квазиупругой силы.

• Нулевая собственная волновая функция одномерного квантового гармонического осциллятора

$$\psi_0 = C_0 \exp\left(\frac{-\alpha^2 x^2}{2}\right),$$

где параметр $\alpha = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}$.

• Энергия колебания гармонического осциллятора

$E_n = \hbar\omega(n + 1{,}2)$,

где n – колебательное квантовое число ($n = 0, 1, 2, 3, \ldots$).

Для квантового числа n существует правило отбора, согласно которому $\Delta n = \pm 1$.

• Нулевая энергия

$E_0 = {}^1\!/_2\, \hbar\omega$.

• Энергия колебания ангармонического осциллятора

$E_v = \hbar\omega[(v + ½) - \gamma\, (v + ½)^2]$,

где v – колебательное квантовое число ($v = 0, 1{,}2, \ldots$);

γ – коэффициент ангармоничности; Δv – любое целое число. Для квантового числа v нет правила отбора, поэтому Δv может принимать любые целочисленные значения.

• Разность энергий двух соседних колебательных уровней

$\Delta E_{v+1,v} = \hbar\omega[1 - 2\gamma\, (v+1)]$

• Максимальное значение квантового числа v

$$v_{max} = \frac{1}{2\gamma} - 1 .$$

• Максимальная энергия колебательного движения

$E_d = \hbar\omega(4\gamma)$.

• Энергия диссоциации двухатомной молекулы

$$E_d = \frac{\hbar\omega}{4\gamma}(1 - 2\gamma).$$

• Момент инерции двухатомной молекулы относительно оси, проходящей через ее центр инерции перпендикулярно прямой, соединяющей ядра атомов,

$J = \mu d^2$,

где μ – приведенная масса молекулы;

d – межъядерное расстояние.

• Вращательная постоянная

$B = \hbar^2/(2¥)$.

• Энергия вращательного движения двухатомной молекулы

$E_{¥} = B¥(¥+1)$,

где ¥ – вращательное квантовое число (¥ = 0, 1, 2, …).

• Спектроскопическое волновое число

$$\tilde{v} = \frac{1}{\lambda},$$

где λ – длина волны излучения.

• Энергия ε фотона излучения связана с спектроскопическим волновым числом v соотношением

$\varepsilon = 2\pi\hbar c\tilde{v}$,

где c – скорость распространения электромагнитного излучения.

8.2.4.1. Примеры решения задач

Пример 1. Собственная угловая частота ω колебаний молекулы HCl равна $5{,}63 \cdot 10^{14}$ с$^{-1}$, коэффициент ангармоничности $\gamma = 0{,}0201$. Определить: 1) энергию $\Delta E_{2,1}$ (в электрон-вольтах) перехода молекулы с первого на второй колебательный энергетический уровень; 2) максимальное квантовое число v_{max}; 3) максимальную колебательную энергию E_{max}, 4) энергию диссоциации E_d.

Решение. 1. Энергию перехода $\Delta E_{v+1,v}$ между двумя соседними уровнями найдем как разность двух значений колебательной энергии:

$\Delta E_{v+1,v} = E_{v+1} - E_v.$

Так как колебательная энергия двухатомной молекулы определяется соотношением

$$E_v = \hbar\omega\left[\left(\nu + \frac{1}{2}\right) - \gamma\left(\nu + \frac{1}{2}\right)^2\right],$$

то

$$\Delta E_{v+1,v} = \hbar\omega\left\{\left[\left(v+\frac{3}{2}\right)-\gamma\left(v+\frac{3}{2}\right)^2\right]-\left[\left(v+\frac{1}{2}\right)-\gamma\left(v+\frac{1}{2}\right)^2\right]\right\}=\hbar\omega\left[1-2\gamma(v+1)\right].$$

Подставив значения h, ω, γ и произведя вычисления, найдем

$\Delta E_{2,1} = 1{,}09\cdot10^{-19}$ Дж или $\Delta E_{2,1} = 0{,}682$ эВ.

2. Максимальное квантовое число $v_{\max}$ найдем, приравняв разность соседних энергетических уровней нулю:

$\Delta E_{v+1,v} = \hbar\omega\left[1 - 2\gamma(v_{\max} + 1)\right] = 0$ или $1 - 2\gamma(v_{\max} + 1) = 0$,

откуда

$$v_{\max} = \frac{1}{2\gamma} - 1\,. \qquad (2)$$

Подставив сюда значение γ и округлив до ближайшего (снизу) целого значения найденного $v_{\max}$ получим

$v_{\max} = 23.$

3. Максимальную колебательную энергию $E_{\max}$ найдем, если в выражение (1) вместо v подставим $v_{\max}$ формуле

$$E_{\max} = \hbar\omega\left[\left(\frac{1}{2\gamma} - 1 + \frac{1}{2}\right) - \gamma\left(\frac{1}{2\gamma} - 1 + \frac{1}{2}\right)^2\right].$$

Выполняя простые преобразования и пренебрегая γ/4 по сравнению с γ/(4γ), получаем

$E_{\max} = \hbar\omega\,/(4\gamma).$

Подставим значения h, ω, γ и произведем вычисления:

$E_{\max} = 7{,}38\cdot10^{-19}$Дж или $E_{\max} = 4{,}61$ эВ.

4. Энергия диссоциации есть энергия, которую необходимо затратить, чтобы отделить атомы в молекуле друг от друга и удалить их без сообщения им кинетической энергии на расстояние, на котором взаимодействие атомов пренебрежимо мало.

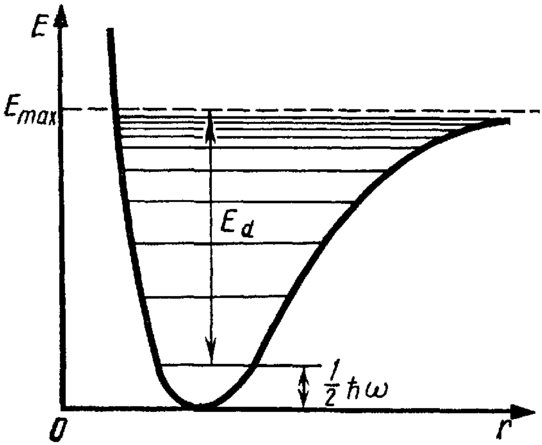

Рис. 8.13

На рис. 8.13 эта энергия отвечает переходу с нулевого колебательного уровня на самый высокий возбужденный, соответствующий v_{max}. Тогда энергия диссоциации

$$E_d = E_{max} - E_0\frac{\hbar\omega}{4\gamma} - \frac{1}{2}\hbar\omega$$

или $$E_d = \frac{\hbar\omega}{4\gamma}(1-2\gamma).$$

Заменив $\hbar\omega/(4\gamma)$ на E_{max} получим $E_d = E_{max}(1 - 2\gamma)$.

Произведя вычисления, найдем $E_d = 4{,}43$ эВ.

Пример 2. Для молекулы HF определить: 1) момент инерции J, если межъядерное расстояние $d = 91{,}7$ нм; 2) вращательную постоянную B; 3) энергию, необходимую для возбуждения молекулы на первый вращательный уровень.

Решение. 1. Если воспользоваться формулой приведенной массы μ молекулы, то ее момент инерции можно выразить соотношением

$$J = \mu d^2 \quad \text{или} \quad J = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}d^2,$$

где m_1 и m_2 – массы атомов водорода и фтора.

Приведенную массу молекулы удобно сначала выразить в а.е.м. (относительные атомные массы химических элементов приведены в табл. 30):

$$\mu = \frac{1\cdot 19}{1+19} = 0{,}95 \text{ а.е.м.}$$

Выразив приведенную массу в единицах СИ $\mu = 0{,}95\cdot 1{,}67\cdot 10^{-27}$ кг $= 1{,}59\cdot 10^{-27}$ кг, найдем момент инерции молекулы HF:

$J = 1{,}33\cdot 10^{-47}$ кг/м^2.

2. Вращательная постоянная B с учетом выражения для ¥ равна $B = \hbar/(2\mu d^2)$.

Подставив значения h, μ, d и произведя вычисления, получим $B = 4{,}37\cdot10^{-22}$ Дж или $B = 2{,}73$ мэВ.

3. Энергия, необходимая для возбуждения молекулы на первый вращательный уровень, равна разности энергий молекулы на первом и нулевом вращательных уровнях.

Так как вращательная энергия двухатомной молекулы выражается соотношением $E_{¥} = B¥(¥ + 1)$, то разность энергий двух соседних вращательных уровней

$\Delta E_{¥+1}$;

$¥ = E_{¥+1} - E_{¥} = \{[B(¥ + 1)(¥ + 2)] - [B¥(¥ + 1)]\}$.

После упрощений получим

$\Delta E_{¥+1}$;

$¥ = 2B(¥ + 1)$.

Положив здесь $¥ = 0$, найдем значение энергии, необходимое для возбуждения молекулы с нулевого уровня на первый:

$\Delta E_{1,0} = 2B = 5{,}46$ мэВ.

8.2.4.2. Задачи для самостоятельного решения

Колебательный спектр двухатомной молекулы

48.1. Изобразить графически зависимость $\psi_0(x)$ и $[\psi_0(x)]^2$ Для нулевой собственной волновой функции осциллятора.

48.2. Используя условие нормировки, определить нормировочный множитель C_0 нулевой собственной волновой функции осциллятора.

48.3. Рассматривая молекулу как квантовый гармонический осциллятор, находящийся в основном состоянии ($n = 0$), найти амплитуду A классических колебаний, выразив ее через параметр α.

48.4. Гармонический осциллятор находится в основном состоянии ($n = 0$). Какова вероятность W обнаружения частицы в области $(-A<x<A)$, где A – амплитуда классических колебаний?

48.5. Определить среднюю потенциальную энергию $(U(x))$ гармонического осциллятора, находящегося в основном состоянии, выразив ее через нулевую энергию E_0.

48.6. Собственная круговая частота со колебаний молекулы водорода равна $8{,}08\cdot10^{14}$ $с^{-1}$. Найти амплитуду A классических колебаний молекулы.

48.7. Зная собственную круговую частоту ω колебаний молекулы CO ($\omega = 4{,}08\cdot10^{14}$ с$^{-1}$), найти коэффициент β квазиупругой силы.

48.**8**. Определить энергию $E_{ВОЗБ}$ возбуждения молекулы HCl с нулевого колебательного энергетического уровня на первый, если известны собственная круговая частота $\omega = 5{,}63\cdot10^{14}$ с$^{-1}$ и коэффициент ангармоничности $\gamma = 0{,}0201$.

48.**9**. Определить число N колебательных энергетических уровней, которое имеет молекула HBr, если коэффициент ангармоничности $\gamma = 0{,}0208$.

48.**10**. Во сколько раз отличаются максимальная и минимальная (отличная от нуля) разности двух соседних энергетических уровней для молекулы H_2 ($\gamma = 0{,}0277$)?

Рекомендованная литература

1. Старостина И.А., Краткий курс физики для бакалавров: учебное пособие / И.А. Старостина, Е.В. Бурдова, Р.С. Сальманов - Казань: Издательство КНИТУ, 2016. - 364 с. - ISBN 978-5-7882-2035-2 - Текст: электронный // ЭБС «Консультант студента»: [сайт]. - URL: http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785788220352.html

2. Полянская Е.Е., Зайковский О.И. Курс физики. 2-е изд., испр. и доп. − Оренбург: Изд-во ОГПУ, 2016. − 148 с. − ISBN 978-5-85859-643-1. Режим доступа: https://www.twirpx.com/file/2170493/

3. Варава А.Н., Общая физика: учебное пособие для вузов / Варава А.Н. - М.: Издательский дом МЭИ, 2017. - ISBN 978-5-383-01085-3 - Текст: электронный // ЭБС «Консультант студента»: [сайт]. - URL: http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785383010853.html

4. Трофимова Т.И., Фирсов А.В. Курс физики с примерами решения задач. В 2 томах. Том 1. М.: КноРус, 2015. − 568 с. − ISBN 978-5-406-04253-3. Режим доступа: https://www.twirpx.com/file/1991197/

5. Повзнер А.А., Андреева А.Г., Шумихина К.А. Физика. Базовый курс. Часть 1. Екатеринбург: Изд-во Урал. ун-та, 2016. − 168 с. − ISBN 978-5-7996-1701-1. Режим доступа: https://www.twirpx.com/file/2061058/

6. Повзнер А.А., Андреева А.Г., Шумихина К.А. Физика. Базовый курс. Часть 2. Екатеринбург: Изд-во Урал. ун-та, 2017. − 144 с. − ISBN 978-5-7996-1948-0. Режим доступа: https://www.twirpx.com/file/2242224/

Учебное издание

МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ
к практическим занятиям по дисциплине
«ФИЗИКА»

для студентов направления подготовки
Профессиональное обучение (по отраслям), профили:
«Экономика и управление», «Информационные технологии и системы», «Электроснабжение», «Безопасность технологических процессов и производств», «Горное дело. Подземная разработка пластовых месторождений», «Горное дело. Электромеханическое оборудование, автоматизация процессов добычи полезных ископаемых и руд», «Горное дело. Технологическая безопасность и горноспасательное дело», «Профессиональная психология», «Управление персоналом», в 9-и частях. Часть 8.2. Элементы квантовой механики

С о с т а в и т е л ь:
Валентин Иванович Сафонов

Печатается в авторской редакции.
Компьютерная верстка и оригинал-макет автора.

Подписано в печать ______________
Формат 60x84 $^{1}/_{16}$. Бумага типограф. Гарнитура Times
Печать офсетная. Усл. печ. л. _____. Уч.-изд. л. _______
Тираж 100 экз. Изд. №______. Заказ №______. Цена договорная.

Издательство Луганского государственного
университета имени Владимира Даля

Свидетельство о государственной регистрации издательства
МИ-СРГ ИД 000003 от 20 ноября 2015 г.

Адрес издательства: 91034, г. Луганск, кв. Молодежный, 20а
Телефон: 8 (0642) 41-34-12, **факс:** 8 (0642) 41-31-60
E-mail: izdat.lguv.dal@gmail.com **http:** //izdat.dahluniver.ru/