

**А.В. Гуляев, С.С. Красильников,  
А.М. Попов, О.В. Тихонова, В.Ю. Харин**

# **СТО ОДИННАДЦАТЬ ЗАДАЧ ПО АТОМНОЙ ФИЗИКЕ**

*Допущено УМО по классическому университетскому образованию  
РФ в качестве учебного пособия для студентов высших учебных  
заведений, обучающихся по направлению подготовки 011200 –  
Физика и по специальности 010701.65 – Физика*

Издательство Московского университета  
2012



**A.V. Gulyaev, S.S. Krasilnikov, A.M. Popov,  
O.V. Tikhonova, V.Yu. Kharin**

**ONE HUNDRED AND ELEVEN  
PROBLEMS ON ATOMIC PHYSICS**

Moscow University Press  
2012

УДК 539.18  
ББК 22.36; 22.344  
С81

**Авторы:**

сотрудники кафедры атомной физики, физики плазмы и микроэлектроники  
физического факультета МГУ: А.В. Гуляев, С.С. Красильников, А.М.  
Попов, О.В. Тихонова, В.Ю. Харин

**Рецензенты:**

Гореславский С.П., доктор физико-математических наук, профессор  
(Московский инженерно-физический институт)

Крайнов В.П., доктор физико-математических наук, профессор  
(Московский физико-технический институт)

**Сто одиннадцать задач по атомной физике: учебное пособие/**  
**С81** А.В. Гуляев и др. – М.: Издательство Московского университета.  
2012. – 196 с.  
ISBN 978-5-211-06390-7

Настоящий сборник задач является учебным пособием по общему курсу «Атомной физики», читаемому студентам 3-его курса физического факультета МГУ. Учебное пособие составлено в виде задачника, причем все задачи снабжены подробными решениями. Очередность содержания задач сборника отражает современную программу лекционного курса «Атомной физики». На протяжении десяти лет (2001-2010 гг.) задачи, входящие в сборник, предлагались для решения наиболее сильной части студентов физического факультета с целью их привлечения к самостоятельной работе, а также для эффективного контроля знаний на уровне оценки «отлично».

Для студентов физических специальностей университетов.

*Ключевые слова:* атом, молекула, квантовая физика.

УДК 539.18  
ББК 22.36; 22.344

**One hundred and eleven problems on atomic physics/**  
A.V. Gulyaev et al. – M.: Moscow University Press, 2012. – 196 p.

This collection of problems is a tutorial on the general course of "Atomic Physics", which is read for the third year students of the Physics Department of Moscow State University. The manual composed in a book of problems, all problems are provided with detailed solutions. The order of tasks in the collection corresponds to the modern program of the lecture course of "Atomic Physics". For ten years (2001-2010) tasks included in the collection, were offered to the best part of students of Physics Department to involve them to self-working, as well as for the effective control of the knowledge on the level of "excellent" mark.

For students of physical sciences.

*Key words:* atom, molecule, quantum physics.

ISBN 978-5-211-06390-7

© Коллектив авторов, 2012  
© Издательство Московского  
университета, 2012



## Оглавление

Глава 1	
Микромир атомно-молекулярных масштабов и классическая физика.....	6
Глава 2	
Волны де Бройля и соотношения неопределённостей. Атом Бора.....	29
Глава 3	
Основы квантовой теории.....	44
Глава 4	
«Барьерные» задачи.....	82
Глава 5	
Квантовомеханическая модель атома водорода.....	92
Глава 6	
Электромагнитные переходы.....	107
Глава 7	
Многоэлектронные атомы.....	119
Глава 8	
Физика молекул.....	149
Глава 9	
Макроскопические системы.....	159
Справочные данные.....	177
Дополнительная литература.....	194

## Глава 1. Микромир атомно-молекулярных масштабов и классическая физика

1. Формула Планка – спектральное распределение плотности энергии равновесного излучения (абсолютно чёрного тела):

$$\rho_{\omega}(T) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3 (\exp(\hbar\omega/kT) - 1)} \text{ [эрг}\cdot\text{с/см}^3\text{]},$$

где  $\omega$  – частота излучения,  $T$  – температура,  $k$  – постоянная Больцмана.

2. Спектральная интенсивность равновесного теплового излучения

$$I_{\omega}(T) = \frac{c}{4\pi} \rho_{\omega}(T) = \frac{\hbar\omega^3}{4\pi^3 c^2 (\exp(\hbar\omega/kT) - 1)} \text{ [эрг/см}^2\text{]}.$$

3. Плотность потока энергии излучения с поверхности абсолютно чёрного тела (испускательная способность):

$$S(T) = \frac{c}{4} u(T) = \sigma T^4 \text{ [эрг/см}^2\cdot\text{с]},$$

где  $\sigma = \frac{\pi^2 k^4}{60 c^2 \hbar^3} = 5.67 \cdot 10^{-5} \text{ [эрг/см}^2\cdot\text{с}\cdot\text{K}^4\text{]}$  – постоянная Стефана-

Больцмана.

4. Связь между энергией фотона  $E$ , частотой  $\omega$  и длиной волны  $\lambda$  :

$$E = \hbar\omega = \frac{2\pi\hbar c}{\lambda}.$$

5. Уравнение Эйнштейна для фотоэффекта:

$$\frac{mv_{\max}^2}{2} = \hbar\omega - A,$$

где  $A$  – работа выхода;  $m$ ,  $v_{\max}$  – масса и максимальная скорость фотоэлектрона.

6. Эффект Комптона.

Изменение длины волны при рассеянии:

$$\Delta\lambda = \lambda - \lambda_0 = \Lambda(1 - \cos\theta),$$

где  $\Lambda = 2\pi\hbar/mc = 2.42 \cdot 10^{-10} \text{ см}$  – комptonовская длина волны электрона;  $\lambda_0$ ,  $\lambda$  – длины волн падающего и рассеянного фотона;  $\theta$  – угол рассеяния фотона.

Энергия рассеянного фотона:

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

Кинетическая энергия электрона отдачи:

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

7. Световое давление (при зеркальном отражении и нормальном падении):

$$p = \frac{I}{c}(1 + r),$$

где  $I$  – интенсивность света,  $r$  – коэффициент зеркального отражения,  $c$  – скорость света.

### Задачи

**1.1(1).** Показать, что в модели атома Томсона, электрон, будучи выведен из положения равновесия, совершает гармонические колебания. Оценить частоту этих колебаний.

### Решение

Согласно модели Томсона атом состоит из положительно заряженного шарообразного остова и распределённых внутри него точечных электронов (так называемый «пудинг с изюмом»). Рассмотрим простейший атом – атом водорода. Он представляет собой однородный положительно заряженный шар с зарядом  $+e$  и точечный электрон с зарядом  $-e$  внутри него. Очевидно, что в равновесии электрон находится в центре шара. Найдем электростатическую силу, действующую на электрон, при выведении из положения равновесия. Пусть  $R$  – радиус атома,  $x$  – смещение электрона относительно центра,  $\rho$  – объёмная плотность положительного заряда атома. Величина  $\rho$  выражена через радиус атома и заряд остова как  $\rho = \frac{e}{\frac{4}{3}\pi R^3}$ , а напряжённость

действующего на электрон поля может быть найдена по теореме Гаусса:

$$4\pi x^2 E = 4\pi \cdot \frac{4}{3}\pi x^3 \rho,$$

откуда

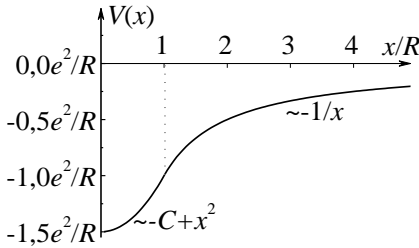
$$E = \frac{e}{R^3} x.$$

Тогда уравнение второго закона Ньютона для электрона в проекции на направление смещения будет выглядеть следующим образом:



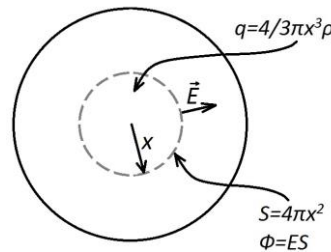
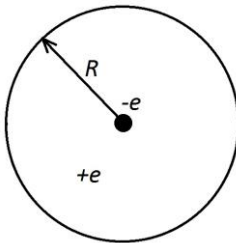
$$m\ddot{x} = -\frac{e^2}{R^3}x,$$

где  $m$  – масса электрона. Это уравнение описывает гармонические колебания с частотой  $\omega = e/\sqrt{mR^3}$ . Выбрав для оценки  $R \approx 1 \text{ \AA}$ , получим



разумное значение частоты  $\omega \approx 1.6 \cdot 10^{16} \text{ с}^{-1}$ . Мы всюду считали величину смещения меньшей, чем радиус атома. Однако можно рассматривать и большие смещения. Тогда зависимость энергии взаимодействия ядра с электроном от смещения будет параболической (соответствующей

гармоническому осциллятору) внутри шара и кулоновской – вне его.



**Примечание.** В своей работе 1904 г. Дж. Дж. Томсон исследовал вопрос существования устойчивых конфигураций многих электронов внутри заряженного шара. Такая система обладает большим числом степеней свободы, что приводит к появлению дискретного спектра собственных частот при малых отклонениях от положения равновесия. Возвращаясь к атому водорода, можно сказать, что наше решение допускает у системы с одним электроном наличие лишь одной частоты. В общем случае можно считать распределение заряда в «пудинге» анизотропным и неоднородным. Тогда колебания при малых значениях смещения будут близки к гармоническим, а максимальное количество собственных частот колебаний равно количеству степеней свободы электрона, т. е. трём. Этот факт противоречит данным спектроскопии, согласно которым частот излучения даже в атоме водорода должно быть значительно больше. Тем не менее, в ряде случаев даже при проведении современных расчётов представление о частицах среды как об

осцилляторах является продуктивным (во многом благодаря простоте вычислений). Например, при расчёте оптического отклика среды с временной дисперсией зачастую пользуются электронной теорией дисперсии Лоренца, основанной на осцилляторной модели диэлектриков и дающей хорошие результаты (см. задачу 9.10).

**1.2(2).** Учитывая силу радиационного трения, действующую на электрон, оценить время жизни атома Томсона в возбуждённом состоянии.

### Решение

Заряженная частица при движении с ускорением излучает волны, обладающие некоторой энергией, вследствие чего механическая энергия частицы уменьшается. Для описания этого явления при квазипериодическом движении Лоренц в 1892 г. предложил ввести эффективную тормозящую силу, действующую на частицу. Она получила название силы радиационного (лучистого) трения.

Будем считать, что излучаемая за период энергия много меньше энергии колебаний. Известно, что для электрического дипольного

излучения энергия, излучаемая в единицу времени, равна  $W = \frac{2e^2}{3c^3} \bar{a}^2$ , где

$\bar{a}$  – ускорение частицы. Тогда в среднем за период  $\left\langle \frac{dE}{dt} \right\rangle = -\frac{2e^2}{3c^3} \langle \bar{a}^2 \rangle$ ,

где  $E$  – энергия, запасённая в атоме. Как уже было сказано, потери энергии за один период считаем малыми, тогда движение электрона в атоме Томсона (как показано в предыдущей задаче) можно приближённо рассматривать как гармоническое, откуда следует, что

$$\langle \bar{a}^2 \rangle \approx \langle \omega_0^4 x^2 \rangle = \frac{2\omega_0^2}{m} \left\langle \frac{m\omega_0^2 x^2}{2} \right\rangle.$$

Выражение под знаком усреднения справа – не что иное, как потенциальная энергия электрона. Используя следствие из теоремы о вириале (а именно то, что в гармоническом осцилляторе средние значения кинетической и потенциальной энергии совпадают, т. е. составляют половину полной механической энергии), получим

$$\begin{aligned} \langle \bar{a}^2 \rangle &\approx \frac{\omega_0^2}{m} \langle E \rangle, \\ \frac{d\langle E \rangle}{dt} &= -\frac{2e^2}{3c^3} \frac{\omega_0^2}{m} \langle E \rangle. \end{aligned}$$

Общее решение этого дифференциального уравнения имеет вид:

$$\langle E \rangle = E_0 e^{-\gamma t},$$

где  $E_0$  – энергия осциллятора в момент времени  $t=0$ ,  $\gamma = \frac{2e^2\omega_0^2}{3mc^3}$  – классическая постоянная затухания. Характерное время затухания колебаний  $\tau = 1/\gamma$ .

Вообще говоря, решение задачи уже получено. Но приближённо может быть найден и закон движения электрона. Найдём выражение для силы радиационного трения как поправки ко второму закону Ньютона. Для этого необходимо излучаемую мощность свести к виду:

$$\langle W \rangle = -\langle (\vec{F}_r, \vec{v}) \rangle,$$

где  $v$  – скорость частицы,  $\vec{F}_r$  – сила радиационного трения. Угловые скобки записаны, чтобы подчеркнуть, что равенство подразумевается в смысле среднего за период. В нулевом приближении (поправка вычисляется нами в первом приближении) электрон движется по гармоническому закону с частотой  $\omega_0$ . Тогда под выражение для силы подходит величина

$$\vec{F}_r = -\frac{2e^2}{3c^3}\omega_0^2\vec{v},$$

так как за период  $\langle \vec{a}^2 \rangle = \omega_0^2 \langle \vec{v}^2 \rangle$ .

Полученная таким образом сила аналогична силе вязкого трения. Наличие в явном виде характеристики системы  $\omega_0$  в выражении свидетельствует о том, что оно получено применением первого шага метода последовательных приближений.

Перейдём к модели Томсона. Как показано в предыдущей задаче, электрон в отсутствие трения совершает гармонические колебания. С появлением радиационного трения уравнение движения должно быть модифицировано:

$$m\ddot{x} = -\frac{e^2}{R^3}x - \frac{2e^2}{3c^3}\omega_0^2\dot{x},$$

что может быть переписано в виде

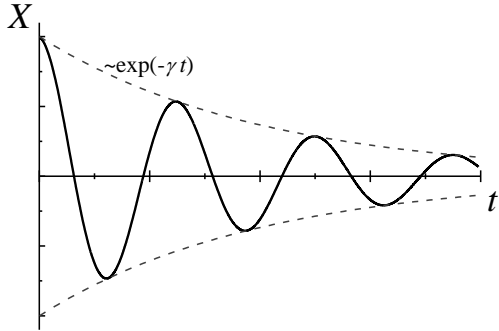
$$\ddot{x} + \gamma\dot{x} + \omega_0^2x = 0,$$

где  $\omega_0 = e/\sqrt{mR^3}$ .

Данное уравнение хорошо известно из механики. Оно описывает затухающие колебания. При этом характерное время затухания  $\tau = 1/\gamma$ .

Подстановка значений из предыдущей задачи приводит к ответу  $\tau \approx 2 \cdot 10^{-9}$  с.

Мы видим, что время затухания колебаний действительно много больше одного периода, т. е. использованные приближения оправданы. С физической точки зрения с помощью введения релаксации в рамках модели Томсона может быть объяснено наличие естественной ширины спектральных линий. Более того, их форма совпадает с формой, предсказываемой точными квантовыми вычислениями.



### Примечание.

При решении нами было сделано несколько допущений. Во-первых, при построении уравнения движения был явно использован приближённый гармонический вид решения. Во-вторых, сила радиационного трения введена через среднюю величину своей мощности. В-третьих, мы учитывали только излучение в электрическом дипольном приближении. Отказ от рассмотрения поправок только к гармоническому движению и расширение метода на произвольное квазипериодическое движение приводит к уравнению движения третьего порядка по времени, что требует, в отличие от уравнений Ньютона, задания не только координаты и скорости частицы в начальный момент времени, но и её ускорения. У такого уравнения могут появляться нефизические решения. Избежать их иногда возможно при условии малости силы радиационного трения. Более точным методом описания движения с учётом излучения является совместное решение релятивистских уравнений механики и уравнений Максвелла. Такой подход приводит к нелинейным уравнениям. Но проблема выбора физических решений остается и там.

**1.3(3).** Считая атом гармоническим осциллятором с частотой  $\omega_0$  (модель Томсона), определить частоты его излучения во внешнем магнитном поле с напряжённостью  $H$  (эффект Зеемана).

### Решение

Частоты излучения атома будут совпадать с частотами колебаний электрона в атоме. В данной задаче за счёт магнитного поля снимается

центральная симметрия задачи. В результате вместо одной частоты колебаний возникает несколько. Найдём их значения.

Запишем уравнение второго закона Ньютона для электрона в гармоническом потенциале во внешнем магнитном поле:

$$m\ddot{\vec{r}} = -m\omega_0^2\vec{r} - \frac{e}{c}[\dot{\vec{r}}, \vec{H}].$$

Квадратными скобками здесь обозначено векторное произведение,  $\vec{r}$  – смещение электрона из положения равновесия. Направим координатную ось  $Oz$  вдоль направления магнитного поля и перепишем уравнение второго закона Ньютона в проекциях на координатные оси, поделив на массу электрона.

$$\begin{cases} \ddot{x} = -\omega_0^2 x - \frac{eH}{mc} \dot{y}, \\ \ddot{y} = -\omega_0^2 y + \frac{eH}{mc} \dot{x}, \\ \ddot{z} = -\omega_0^2 z. \end{cases}$$

Уравнение, относящееся к оси  $Oz$ , не связано с остальными и соответствует гармоническим колебаниям с частотой  $\omega_0$ . Два других уравнения представляют собой систему линейных дифференциальных уравнений второго порядка. Методы решения таких систем хорошо изучены. В силу линейности для получения значений частоты мы можем искать решение в виде:

$$x = Xe^{i\omega t},$$

$$y = Ye^{i\omega t}.$$

Коэффициенты  $X$  и  $Y$ , вообще говоря, комплексны. Подстановка в исходную систему приведёт нас к системе уравнений на эти коэффициенты:

$$\begin{cases} (\omega_0^2 - \omega^2)X + 2i\omega\Omega Y = 0, \\ -2i\omega\Omega X + (\omega_0^2 - \omega^2)Y = 0. \end{cases}$$

Здесь введено обозначение  $\Omega = eH/2mc$ . Условие существования нетривиального решения этой системы (тривиальное описывает ситуацию, когда колебания отсутствуют) есть равенство нулю её детерминанта. Из него могут быть найдены возможные значения  $\omega$ .

$$\begin{vmatrix} \omega_0^2 - \omega^2 & 2i\omega\Omega \\ -2i\omega\Omega & \omega_0^2 - \omega^2 \end{vmatrix} = (\omega_0^2 - \omega^2)^2 - (2\omega\Omega)^2 = 0,$$

откуда

$$\omega_0^2 - \omega^2 = \pm 2\omega\Omega,$$

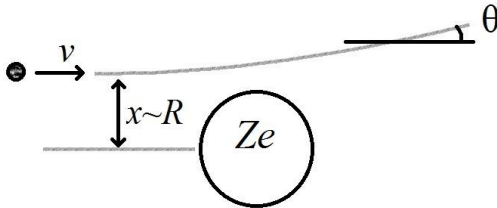
$$\omega = \sqrt{\omega_0^2 + \Omega^2} \pm \Omega.$$

По состоянию на 2010 г. рекордным значением постоянного магнитного поля, созданного человеком, является 45 Тл ( $4.5 \cdot 10^5$  Гс). Создан такой непрерывный магнит в лаборатории National High Magnetic Field lab во Флориде. Это соответствует частоте  $\Omega \approx 3.96 \cdot 10^{12} \text{ с}^{-1}$ . Таким образом, в подавляющем большинстве случаев для лабораторных условий в подкоренном выражении можно оставить только первое слагаемое. Тогда

$$\begin{aligned} \omega &= \omega_0 \pm \Omega, \\ \omega &= \omega_0. \end{aligned}$$

**1.4(4).** Оценить максимальный угол рассеяния  $\alpha$ -частицы с энергией  $E_\alpha$  на положительно заряженном шаре (заряд  $Ze$ ) радиуса  $R$ . Сделать оценку для случая  $E_\alpha = 5$  МэВ,  $Z = 79$ ,  $R = 10^{-8}$  см.

### Решение



Для оценки угла отклонения достаточно следующих рассуждений. При пролёте  $\alpha$ -частицы через центр шара отклонения от прямой траектории не будет. При больших значениях прицельного параметра угол

отклонения будет убывать с ростом прицельного параметра. Следовательно, наибольшее отклонение должно наблюдаться при значениях прицельного параметра порядка радиуса шара. Когда налетающая частица достаточно быстрая, в нулевом приближении можно учитывать силу, действующую на неё, такой же, как если бы частица не отклонялась вообще.

Таким образом, в первом приближении может быть получена нормальная составляющая импульса после рассеяния, а угол может быть выражен через неё. Оценим составляющую импульса, нормальную к начальному направлению движения. Согласно закону изменения импульса

$$p_y \sim F_y \Delta t.$$

Здесь  $F_y$  – характерное значение силы, действующей на частицу во время взаимодействия в направлении, перпендикулярном направлению начального движения,  $\Delta t$  – характерное время взаимодействия.

$$F_y \sim \frac{Ze^2}{R^2}.$$

$$\Delta t \sim \frac{2R}{v}.$$

Если угол отклонения мал (а только тогда наши рассуждения применимы), то его тангенс приближённо равен самому углу:

$$\vartheta \approx \frac{p_y}{p_x} \approx \frac{2Ze^2}{Rmv^2}.$$

Скорость же движения  $v$  может быть выражена через энергию. По условию задачи частица нерелятивистская, так как её кинетическая энергия (5 МэВ) много меньше энергии покоя (3.7 ГэВ). Тогда

$$\vartheta \approx \frac{p_y}{p_x} \approx \frac{Ze^2}{R} \frac{1}{E}.$$

Подстановка численных значений приводит к результату

$$\vartheta \approx 0.2 \cdot 10^{-3} \text{ рад.}$$

Малое значение угла говорит о применимости сделанных допущений.

**Примечание.** Числа, приведённые в условии, соответствуют знаменитому опыту Резерфорда по рассеянию  $\alpha$ -частиц на золотых фольгах. В статье 1911 г. Э. Резерфорд описывает результаты проведённого эксперимента и сравнивает их с оценками, получаемыми в рамках модели Дж. Дж. Томсона. Модель Томсона, как мы видели в этой задаче, предсказывает рассеяние лишь на небольшие углы: альфа-частицы обладали достаточной энергией, чтобы «пробить» пудинг. Однако в эксперименте наблюдалось в том числе и рассеяние на большие углы, включая углы близкие к  $\pi$ , что коренным образом не согласуется с моделью. Резерфорд предположил, что положительный заряд и масса сосредоточены в центре атома. Расчёт показал соответствие такого предположения данным эксперимента. Так в опыте Резерфорда было открыто атомное ядро. С того же времени модель Томсона утратила свою значимость, и стало необходимо построение теории атомов с учётом данных о наличии ядра.

**1.5(5).** Определить спектральную интенсивность тормозного рентгеновского излучения, возникающего при рассеянии быстрой заряженной частицы с энергией  $E$  в поле ядра с зарядом  $Z$ . Считать, что

$E \gg Ze^2/b$ ,  $b$  – прицельный параметр. **Указание:** Траекторию движения частицы можно приближённо считать прямолинейной.

### Решение

Выберем систему координат следующим образом. Начало отсчета совместим с ядром, ось  $x$  направим по вектору скорости частицы, а ось  $y$  – в перпендикулярном направлении. Тогда для интенсивности излучения во всех направлениях справедливо следующее соотношение:

$$I(\omega) = \frac{2e^2}{3c^3} (a_x^2(\omega) + a_y^2(\omega)),$$

где  $a$  – ускорение частицы.

Ускорение, согласно указанию, найдём по второму закону Ньютона и закону Кулона как первую поправку к равномерному прямолинейному движению:

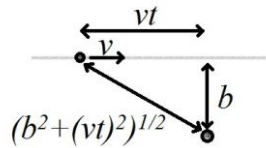
$$m\vec{a}(t) = \frac{Ze^2\vec{r}(t)}{r^3(t)},$$

$$r^2(t) = b^2 + v^2t^2.$$

Начало отсчёта времени мы связали со временем пролёта частицей ядра. Само ядро в этой задаче считаем неподвижным. Тогда

$$a_x(t) = \frac{Ze^2vt}{m(b^2 + v^2t^2)^{3/2}},$$

$$a_y(t) = \frac{Ze^2b}{m(b^2 + v^2t^2)^{3/2}}.$$



Всё, что осталось сделать – это провести преобразование Фурье полученных зависимостей. Рассмотрим процедуру взятия необходимого интеграла на примере зависимости  $a_x(t)$ . Для начала проведём обезразмеривание интеграла:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{Ze^2vt \exp(-i\omega t)}{m(b^2 + v^2t^2)^{3/2}} dt = \frac{Ze^2}{m vb} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{x \exp(-i\alpha x)}{(1 + x^2)^{3/2}} dx.$$



Здесь приняты обозначения  $x = vt/b$ ,  $\alpha = \omega b/v$ . Далее введём замену  $x = sh\xi$  и применим метод интегрирования по частям.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{sh\xi \exp(-i\alpha sh(\xi))}{ch^2\xi} d\xi = - \int_{\xi \rightarrow -\infty}^{\xi \rightarrow +\infty} \exp(-i\alpha sh(\xi)) d \frac{1}{ch\xi} = -2i\alpha \int_0^{+\infty} \cos(\alpha sh(\xi)) d\xi.$$

Последний интеграл хорошо известен в математике и выражается через функцию Макдональда (известную в англоязычной литературе как модифицированная функция Бесселя 2 рода):

$$\int_0^{+\infty} \cos(\alpha sh(\xi)) d\xi = K_0(\alpha).$$

Возвращаясь к исходным обозначениям, получим

$$a_x(\omega) = -2i \frac{Ze^2 \omega}{mv^2} K_0(\omega b/v).$$

Нетрудно заметить, что фурье-образы компонент ускорений связаны соотношением

$$a_x(\omega) = i \frac{v}{b} \frac{d}{d\omega} a_y(\omega),$$

откуда сразу можно получить  $a_y(\omega)$ , воспользовавшись выражением

$$\int \alpha K_0(\alpha) d\alpha = -\alpha K_1(\alpha):$$

$$a_y(\omega) = 2 \frac{Ze^2 \omega}{mv^2} K_1(\omega b/v).$$

Тогда спектральная плотность интенсивности тормозного

излучения выглядит как

$$I(\omega) = \frac{8Z^2 e^6 \omega^2}{3m^2 c^3 v^4} \left[ (K_0(\omega b/v))^2 + (K_1(\omega b/v))^2 \right].$$

График этой зависимости приведён на рисунке.

Интересным является асимптотический вид полученного спектра. Используя асимптотику функции Макдональда при больших значениях аргумента

$$K_n(\alpha) \approx \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} \exp(-\alpha),$$

получим высокочастотную часть спектра тормозного излучения:

$$I(\omega) \approx \frac{8\pi Z^2 e^6 \omega}{3m^2 c^3 v^3 b} \exp(-\omega b/v).$$

**Примечание.** Из полученного выражения для спектра тормозного излучения видно, что, будучи рассчитанным по классическим законам, он неограничен по частоте. То есть, в спектре тормозного излучения в классическом случае есть сколь угодно высокие частоты. Это коренным образом противоречит квантовой теории, согласно которой электроном с энергией  $E = mv^2/2$  в принципе в процессе торможения не может быть испущен фотон с энергией, превышающей  $E$ . Таким образом, квантовая теория предсказывает существование коротковолновой границы спектра тормозного излучения (так называемый квантовый предел), определяемой из условия:

$$\begin{aligned} \hbar\omega_{\max} &= E, \\ \lambda_{\min} &= 2\pi\hbar c/E. \end{aligned}$$

В этом проявляется одно из отличий квантовой теории от теории классической. На существовании коротковолновой границы спектра тормозного излучения основан один из методов измерения постоянной Планка.

**1.6(6).** В рамках классической электродинамики оценить время падения электрона на ядро с зарядом  $Ze$ . Считать, что в начальный момент времени электрон находится на круговой орбите радиуса  $r = a_0 n^2/Z$ ,  $a_0$  – боровский радиус.

### Решение

Решение проведём аналогично задаче 1.2. Движение электрона по окружности происходит с ускорением. Значит, такой электрон излучает электромагнитные волны, следовательно, теряет энергию. Снова будем считать, что время падения электрона на ядро много больше периода его обращения по орбите. Механическая энергия движения электрона по окружности складывается из кинетической и потенциальной составляющих:

$$E = T + V.$$

Решая задачу о движении по окружности в кулоновском потенциале, найдём

$$V = -\frac{Ze^2}{r},$$

$$T = \frac{Ze^2}{2r},$$

$$E = -\frac{Ze^2}{2r}.$$

Два последних равенства могут быть выписаны сразу из первого, как следствие теоремы вириала. С другой стороны, убыль механической энергии обеспечивается излучением:

$$\frac{dE}{dt} = -\frac{2e^2}{3c^3} a^2.$$

Ускорение  $a$  найдём из второго закона Ньютона:

$$|a| = \frac{1}{m} \frac{Ze^2}{r^2}.$$

Подставив выражение для ускорения и приняв во внимание зависимость механической энергии от радиуса, мы получим дифференциальное уравнение для механической энергии электрона.

$$\frac{dE}{dt} = -\frac{2Z^2 e^6}{3m^2 c^3} \frac{1}{r^4},$$

$$\frac{dE}{dt} = -\frac{32}{3Z^2 e^2 m^2 c^3} E^4.$$

Полученное уравнение легко решается методом разделения переменных:

$$-\frac{dE}{E^4} = \frac{32}{3Z^2 e^2 m^2 c^3} dt.$$

Проинтегрируем обе части от начального момента времени до момента  $t$ :

$$-\frac{1}{E(0)^3} + \frac{1}{E(t)^3} = \frac{32}{Z^2 e^2 m^2 c^3} t.$$

Выразив явно зависимость  $E(t)$ , нетрудно заметить, что в некоторый момент времени энергия обращается в минус бесконечность. С точки зрения нашей модели это неудивительно. Чем ближе электрон к ядру, тем ниже его энергия. Случай  $E(t) \xrightarrow{t \rightarrow \tau} -\infty$  как раз и соответствует падению на ядро:  $1/E(t)^3 \xrightarrow{t \rightarrow \tau} 0$ . Тогда

$$-\frac{1}{E(0)^3} = \frac{32}{Z^2 e^2 m^2 c^3} \tau,$$

$$\tau = \frac{m^2 c^3 a_0^3}{4e^4} \frac{n^6}{Z^4}.$$

$$\tau \approx \frac{n^6}{Z^4} \cdot 1.3 \cdot 10^{-11} \text{ с.}$$

Устойчиво такой атом существовать не может: электрон в нём очень быстро падает на ядро. Следует отдельно отметить, что, в отличие от возбуждённого атома Томсона, изменение энергии в этой модели происходит не по экспоненциальному закону, и, разумеется, даёт спектр излучения, несоответствующий действительности. Более того, в процессе падения каждого электрона в таком атоме должна быть излучена очень большая (а в случае точечного ядра – бесконечная) энергия.

**Примечание.** Сразу после открытия ядра Резерфордом была предложена планетарная модель атома. В таком атоме все электроны вращаются по орбитам вокруг положительно заряженного ядра (здесь прослеживается некоторая аналогия с планетами Солнечной системы – отсюда и название модели). Однако данная модель практически сразу подверглась критике. Дело в том, что движение электронов по орбитам неизбежно происходит с ускорением, а значит, и с излучением электромагнитных волн. То есть, электроны должны постоянно терять свою энергию, в результате чего падать на ядро. Это могло бы быть оправдано, если процесс падения электронов на ядро был бы сколько-нибудь продолжительным. Но расчёт, напротив, показывает очень малое время жизни таких атомов. Вывод: планетарная модель не смогла удовлетворительно описать не только процессы, происходящие на атомном уровне, но и само существование атомов.

**1.7(7).** Оценить поток энергии ультрафиолетового излучения от Солнца на поверхности Земли. Считать, что излучение Солнца имеет планковский спектр с температурой  $T = 5700$  К. Поглощением излучения в атмосфере Земли пренебречь.

### Решение

Спектр излучения Солнца достаточно хорошо описывается в приближении абсолютно чёрного тела. Пользуясь формулой Планка, найдём спектральную плотность потока излучения у поверхности Солнца.

$$u_{sun} = \frac{c}{4} \rho_{\omega} = \frac{\hbar \omega^3}{4\pi^2 c^2} \frac{1}{e^{\frac{\hbar \omega}{kT}} - 1},$$

где  $\omega$  – частота излучения,  $T$  – температура поверхности Солнца,  $k$  – постоянная Больцмана. Из того, что излучение расходится симметрично во все стороны можно заключить, что плотность потока излучения обратно пропорциональна квадрату расстояния. Действительно, из сохранения энергии следует равенство

$$uS = 4\pi R^2 u = \text{const.}$$

Здесь  $S$  – площадь сферы радиусом  $R$  с центром, совпадающим с центром Солнца, где  $R$  – расстояние от центра Солнца до точки наблюдения (в наших рассуждениях это будет расстояние от Солнца до Земли). Тогда спектральная плотность потока излучения над верхними слоями атмосферы равна

$$u_{earth} = \left( \frac{R_{sun}}{R} \right)^2 u_{sun}.$$

Через атмосферу проходит далеко не всё электромагнитное излучение, летящее к Земле. Часть его будет поглощена, часть – отражена, причём на каждой частоте коэффициент отражения будет иметь своё значение. Для учёта этого факта введём коэффициент прохождения излучения через атмосферу  $K(\omega)$ . Тогда на поверхности Земли

$$u = K(\omega) \left( \frac{R_{sun}}{R} \right)^2 u_{sun}.$$

Остается только это посчитать плотность потока излучения у поверхности Земли во всём УФ диапазоне. Здесь будем полагать, что Солнце находится в зените, в противном случае необходимо вводить в коэффициент  $K(\omega)$  зависимость от углового положения Солнца и умножать плотность потока на квадрат косинуса угла падения лучей. В наших же допущениях

$$I_{UV} = \int_{\omega_1}^{\omega_2} u(\omega) d\omega.$$

Под  $\omega_1$  и  $\omega_2$  подразумеваются границы УФ диапазона. Традиционно под ультрафиолетовой областью понимают область длин волн от 10 до 400 нм. Следует отметить, однако, что излучение, начиная с длины волны 280 нм практически не доходит до поверхности. Это соответствует значениям  $\hbar\omega_1/kT \approx 6.2$  (400 нм),  $\hbar\omega_2/kT \approx 8.9$  (280 нм). Для вычислений интеграл удобно обезразмерить, вводя переменную  $\xi = \hbar\omega/kT$ :

$$I_{UV} = \left( \frac{R_{sun}}{R} \right)^2 \frac{(kT)^4}{4\pi^2 c^2 \hbar^3} \int_{6.2}^{8.9} \tilde{K}(\xi) \frac{\xi^3}{e^{\xi} - 1} d\xi,$$

где  $\tilde{K}(\xi) = K(\xi kT/\hbar)$ . Предынтегральный множитель может быть вычислен сразу:

$$I_{UV} = 21 \text{ мВт/см}^2 \cdot J,$$

где  $J = \int_{6.2}^{8.9} \tilde{K}(\xi) \frac{\xi^3}{e^\xi - 1} d\xi$ . Этот интеграл можно взять численно с

использованием данных по коэффициенту прохождения. Мы же оценим его из следующих соображений: экспонента в знаменателе в диапазоне интегрирования много больше единицы. Кроме того, второй множитель в подынтегральном выражении быстро убывает, убывает и коэффициент  $\tilde{K}(\xi)$ . «Хвост» зависимости вносит малый вклад. Тогда мы можем взять в качестве  $\tilde{K}(\xi)$  значение на нижнем пределе интегрирования и продлить интегрирование до бесконечности. Считая, что  $\tilde{K}(\xi) \approx 1$ , получим:

$$J \approx \int_{6.2}^{+\infty} \xi^3 e^{-\xi} d\xi = \xi^3 e^{-\xi} \Big|_{\xi=6.2} + 3\xi^2 e^{-\xi} \Big|_{\xi=6.2} + 6\xi e^{-\xi} \Big|_{\xi=6.2} + 6e^{-\xi} \Big|_{\xi=6.2} \approx 0.8.$$

$$I_{UV} = 17 \text{ мВт/см}^2.$$

**1.8(8).** При какой температуре термодинамически равновесной водородной плазмы с плотностью  $\rho = 1 \text{ г/см}^3$  давление электромагнитного излучения сравняется с газокинетическим давлением?

### Решение

Для решения этой задачи будем считать плазму идеальным газом. Также предположим, что весь водород диссоциирован и ионизован. Тогда давление будет обеспечиваться как протонами, так и электронами, вследствие чего необходимо ввести множитель 2 в уравнение состояния идеального газа:

$$p = 2nkT,$$

где  $n$  – концентрация протонов. Перепишем формулу в виде

$$p = \frac{2\rho kT}{m_p},$$

$m_p$  – масса протона.

Давление электромагнитного излучения в состоянии термодинамического равновесия в три раза меньше плотности электромагнитной энергии, которая, в свою очередь, может быть получена из формулы Планка:

$$p_{e-m} = \frac{1}{3} \int_0^{+\infty} \rho_\omega d\omega,$$

$$p_{e-m} = \frac{(kT)^4}{3\pi^2 c^3 \hbar^3} \int_0^\infty \frac{\xi^3 d\xi}{e^\xi - 1} = \frac{\pi^2 (kT)^4}{45 c^3 \hbar^3}.$$

По условию  $p_{e-m} = p$ . Из этого равенства получим выражение для температуры:

$$T = \frac{c\hbar}{k} \sqrt[3]{\frac{90\rho}{\pi^2 m_p}}.$$

Численное же значение  $T \approx 3.8 \cdot 10^7$  К, что является действительно очень высокой температурой. Она соответствует энергии около 3.2 кэВ и, разумеется, степени диссоциации и ионизации при такой температуре практически равны единице.

**1.9(9).** Импульс излучения рубинового лазера ( $\lambda = 0.69$  мкм) с энергией  $Q = 1$  Дж и длительностью  $\tau = 1$  нс падает на зеркальную металлическую пластину с коэффициентом отражения  $R \approx 1$ . Определить силу светового давления, действующую на пластину.

### Решение

Будем считать временную форму импульса лазера прямоугольной. Тогда согласно закону изменения импульса в электродинамике, механический импульс, сообщённый пластине, равен

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

где  $I$  – интенсивность излучения,  $c$  – скорость света,  $S$  – характерная поперечная площадь импульса,  $\tau$  – его длительность. Множитель 2 возник в результате того, что волна полностью отражается от поверхности. Средняя сила, действующая на пластинку, равна отношению переданного ей механического импульса ко времени  $\tau$ .

$$F \approx 2 \frac{I}{c} S.$$

Выражая интенсивность излучения через энергию импульса

$$I \approx \frac{Q}{S\tau},$$

получим для силы светового давления:

$$F \approx 2 \frac{Q}{c\tau},$$

$$F \approx 6.7 \text{ Н}.$$

Полученный результат легко понять, исходя из корпускулярных представлений о свете. Действительно, импульс, передаваемый пластине при отражении одного кванта света,  $p_1 = 2\hbar k = 2\hbar\omega/c$ . Поскольку число квантов в световом пучке  $N = Q/\hbar\omega$ , то полный механический импульс, переданный пластине,  $P = Np_1 = 2Q/c$ , откуда следует полученный ранее результат. Отметим, что величина силы не зависит от длины волны излучения.

**1.10(10).** В рамках классической электродинамики определить силу давления, действующую на свободный электрон в поле монохроматической электромагнитной волны.

### Решение

Уравнение, описывающее движение свободного электрона в поле электромагнитной волны, имеет вид:

$$m\dot{\vec{v}} = -e\vec{E} - \frac{e}{c}[\vec{v} \times \vec{H}] + \vec{f}_r,$$

где  $\vec{f}_r = \frac{2e^2}{3c^3}\ddot{\vec{v}}$  – сила радиационного трения. Считая электрон нерелятивистским, а силу радиационного трения малой по сравнению с силой  $eE$ , выражение для силы радиационного трения приближенно запишем в виде  $\vec{f}_r = -\frac{2e^2\omega^2}{3c^3}\vec{v}$ , где  $\omega$  – частота поля электромагнитной волны.

Выберем систему координат так, что ось  $z$  направлена вдоль вектора  $\vec{k}$ , электрическое и магнитное поля волны имеют только  $x$  и  $y$  компоненты соответственно. Тогда уравнения движения примут вид

$$\dot{v}_x + \gamma v_x \approx -(eE_0/m)\cos\omega t,$$

$$m\dot{v}_z = -(ev_x H_0/c)\cos\omega t.$$

Здесь  $\gamma = 2e^2\omega^2/3mc^3$  – классическая постоянная затухания. Выражая из полученной системы уравнений  $v_x = \frac{-eE_0}{m(\omega^2 + \gamma^2)}(\omega \sin \omega t + \gamma \cos \omega t)$ , получим уравнение для  $z$ -компоненты скорости:



$$m\dot{v}_z = \frac{e^2}{mc} \frac{E_0 H_0}{(\omega^2 + \gamma^2)} (\omega \sin \omega t + \gamma \cos \omega t) \cos \omega t.$$

Усредняя полученное уравнение по периоду высокочастотных колебаний и учитывая, что  $\gamma \ll \omega$ , получим

$$m\dot{v}_z \approx \frac{e^2 \gamma}{2mc\omega^2} E_0 H_0 = \frac{1}{c} \sigma_T I,$$

где  $\sigma_T = (8\pi/3)\pi r_e^2$  – томсоновское сечение рассеяния,  $r_e = e^2/mc^2$  – классический радиус электрона,  $I = cE_0^2/8\pi$  – интенсивность излучения.

**Примечание.** Решение данной задачи вскрывает физический механизм возникновения силы светового давления на материальные объекты, и показывает, что этот механизм является чисто классическим по своей сути и не требует привлечения квантовых представлений об электромагнитном излучении.

**1.11(11).** На металлическую поверхность с работой выхода

$A = 3.6$  эВ воздействует электромагнитное поле  $E = E_0(1 + \cos \omega t) \cos \omega_0 t$  ( $E$  – напряженность электрического поля волны). Найти энергию фотоэлектронов, если  $\omega = 4.8 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}$ ,  $\omega_0 = 6.4 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}$ .

### Решение

Чтобы найти энергию фотоэлектронов, необходимо найти значения энергии фотонов, присутствующих в заданном поле. Для этого поле удобно представить в виде суперпозиции монохроматических волн.

$$E_0(1 + \cos \omega t) \cos \omega_0 t = E_0 \left( \cos \omega_0 t + \frac{1}{2} \cos(\omega - \omega_0)t + \frac{1}{2} \cos(\omega + \omega_0)t \right).$$

Как видно из последнего равенства, в падающей волне присутствуют фотоны с частотами  $\omega_0$ ,  $\omega_0 - \omega$ ,  $\omega_0 + \omega$ . Найдём энергии этих фотонов по данным из условия:

$$\hbar \omega_0 = 4.2 \text{ эВ},$$

$$\hbar(\omega_0 - \omega) = 1.05 \text{ эВ},$$

$$\hbar(\omega_0 + \omega) = 7.4 \text{ эВ}.$$

Как видим, энергия квантов превышает красную границу фотоэффекта только для фотонов с частотами  $\omega_0$ ,  $\omega_0 + \omega$ . Тогда по формуле Эйнштейна для фотоэффекта найдём соответствующие энергии фотоэлектронов.

$$\begin{aligned}
 T_1 &= \hbar\omega_0 - A, \\
 T_2 &= \hbar(\omega_0 + \omega) - A. \\
 T_1 &= 0.6 \text{ эВ}, \\
 T_2 &= 3.8 \text{ эВ}.
 \end{aligned}$$

**1.12(12).** Оценить величину фототока с поверхности металла площадью  $S = 1 \text{ см}^2$  (работа выхода  $W = 4 \text{ эВ}$ ) под действием излучения Солнца. Солнце считать планковским излучателем с температурой  $T = 5700 \text{ К}$ . Радиус Солнца  $R_{sun} = 7 \cdot 10^{10} \text{ см}$ , радиус земной орбиты  $r = 1.5 \cdot 10^{13} \text{ см}$ . Величина квантового выхода фотоэффекта (вероятность вырывания электрона фотоном)  $\eta = 0.01$ .

### Решение

Величину фототока будем рассчитывать как заряд, уходящий с поверхности металла в единицу времени. Для этого найдём количество электронов, вырываемых солнечными фотонами. В рассматриваемом процессе будут участвовать только фотоны с энергией, превышающей работу выхода. Чтобы найти спектральную плотность потока фотонов на поверхности Земли (количество фотонов с заданной частотой, падающих на поверхность Земли на единичную площадь в единицу времени), можно разделить спектральную плотность потока солнечной энергии на энергию одного фотона на данной частоте. Согласно промежуточному результату задачи 1.7

$$u = K(\omega) \left( \frac{R_{sun}}{r} \right)^2 u_{sun},$$

где  $u$  – спектральная плотность потока излучения у поверхности Земли,  $K(\omega)$  – коэффициент прохождения для атмосферы,  $R_{sun}$  – радиус Солнца, а

$$u_{sun} = \frac{\hbar\omega^3}{4\pi^2 c^2} \frac{1}{\exp(\hbar\omega/kT) - 1}.$$

Тогда число фотонов на частоте  $\omega$ , достигающих Земли, равно

$$\begin{aligned}
 n_\omega &= \frac{u}{\hbar\omega}, \\
 n_\omega &= \frac{\omega^2}{4\pi^2 c^2} \left( \frac{R_s}{r} \right)^2 \frac{K(\omega)}{\exp(\hbar\omega/kT) - 1}.
 \end{aligned}$$

При этом только те из них, энергия которых больше 4 эВ, могут участвовать в фотоэффекте. Суммарное число таких фотонов

$$N_{ph} = \int_{W/h}^{\infty} \frac{\omega^2}{4\pi^2 c^2} \left( \frac{R_s}{r} \right)^2 \frac{K(\omega)}{\exp(\hbar\omega/kT) - 1} d\omega.$$

Из них выбивает электроны лишь часть  $\eta$ .

Принимая во внимание все вышесказанное, найдем фототок.

$$I = e\eta S N_{ph},$$

$$I = e\eta S \left( \frac{R_s}{r} \right)^2 \frac{1}{4\pi^2 c^2} \int_{W/h}^{\infty} \omega^2 \frac{K(\omega)}{\exp(\hbar\omega/kT) - 1} d\omega.$$

Для оценки данного выражения заметим, что на нижнем пределе интегрирования экспонента в знаменателе уже принимает большое значение, то есть, единицей можно пренебречь. Кроме того, интеграл удобно обезразмерить, введя переменную  $\xi = \hbar\omega/kT$ :

$$I = e\eta S \left( \frac{R_s}{r} \right)^2 \frac{(kT)^3}{4\pi^2 c^2 \hbar^3} \int_{W/kT}^{\infty} \xi^2 \exp(-\xi) \tilde{K}(\xi) d\xi,$$

где  $\tilde{K}(\xi) = K(\xi kT/\hbar)$ . Подставляя сюда численные значения ( $\tilde{K}(\xi) \approx 1$ ), получим

$$I \approx e\eta S \left( \frac{R_s}{r} \right)^2 \frac{(kT)^3}{4\pi^2 c^2 \hbar^3} \int_{W/kT}^{\infty} \xi^2 \exp(-\xi) d\xi \approx 0.407 \cdot 10^{-6} \text{ А} \cdot \int_{W/kT}^{\infty} \xi^2 \exp(-\xi) d\xi,$$

$$\int_{W/kT}^{\infty} \xi^2 \exp(-\xi) d\xi = \left( \xi^2 + 2\xi + 2 \right) \exp(-\xi) \Big|_{\xi=W/kT}^{\infty} \approx 0.0245,$$

$$I \approx 10 \text{ нА}.$$

**1.13(13).** При прохождении рентгеновского излучения через некоторое вещество было обнаружено, что максимальная кинетическая энергия комптоновских электронов отдачи составила  $T_{\max} = 0.44$  МэВ. Определить длину волны рентгеновского излучения.

### Решение

Считая, что электроны в веществе являются свободными и неподвижными (это допущение справедливо, т.к. их энергия связи в веществе составляет единицы электронвольт), согласно формуле для комптон-эффекта можно записать

$$\lambda - \lambda_0 = \Lambda_e (1 - \cos\theta).$$

Здесь  $\theta$  – угол рассеяния,  $\lambda_0, \lambda$  – длины волн фотонов до и после рассеяния,  $\Lambda_e = h/mc$  – комптоновская длина волны электрона.

Поскольку максимальное изменение длины волны фотона происходит при рассеянии назад, то в этом случае электрон отдачи будет иметь максимальное значение кинетической энергии. Запишем для этого случая закон сохранения энергии:

$$\frac{hc}{\lambda_0} = \frac{hc}{\lambda} + T_{\max}.$$

Учитывая, что в рассматриваемом случае  $\lambda = \lambda_0 + 2\Lambda_e$ , получим следующее уравнение для определения длины волны  $\lambda_0$ :

$$\lambda_0^2 + 2\Lambda_e\lambda_0 - \frac{2hc\Lambda_e}{T_{\max}} = 0.$$

Решая полученное уравнение, находим

$$\lambda_0 = \Lambda_e \left( -1 + \sqrt{1 + 2mc^2/T_{\max}} \right).$$

Подставив значение, приведённое в условии, найдём  $\lambda_0 \approx 0.82\Lambda_e \approx 2.0 \cdot 10^{-10}$  см.

**1.14(14).** Определить длину волны рассеянного назад фотона ( $\lambda_0 = 10.6$  мкм) на релятивистском электроне с энергией  $E_e = 20$  ГэВ, движущемся ему навстречу.

### Решение

Запишем закон сохранения энергии и закон сохранения импульса в проекции на направление рассеяния для электрона и кванта излучения, а также соотношения между энергией и импульсом релятивистского электрона.

$$\begin{cases} \hbar\omega + E = \hbar\omega' + E', \\ \hbar\frac{\omega}{c} - p = -\hbar\frac{\omega'}{c} - p', \\ E = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}, \\ E' = \sqrt{p'^2 c^2 + m^2 c^4}. \end{cases}$$

Решая эту систему относительно  $\hbar\omega'$ , получим

$$\hbar\omega' = \hbar\omega \frac{E + \sqrt{E^2 - m^2 c^4}}{2\hbar\omega + E - \sqrt{E^2 - m^2 c^4}}.$$

Теперь мы можем принять во внимание, что кинетическая энергия электрона много больше, чем его энергия покоя, т.е.

$$\sqrt{E^2 - m^2 c^4} \approx E - \frac{m^2 c^4}{2E}. \quad \text{В условиях, приведённых в задаче,}$$

$$\frac{m^2 c^4}{2E} \gg 2\hbar\omega. \quad \text{Тогда } \hbar\omega' \approx 4\hbar\omega \left( \frac{E}{mc^2} \right)^2. \quad \text{Это означает, что в ходе такого}$$

рассеяния могут образовываться кванты с длиной волны в  $\left( \frac{2E}{mc^2} \right)^2$  раз

меньше начального значения, т.е.  $\lambda \approx 1.7 \cdot 10^{-5} \text{ \AA}$ .

Мы получили, что при рассеянии кванта на электроне, движущемся навстречу, можно получить существенное увеличение частоты излучения. Фактически, рассеяние лазерного пучка видимого или ИК диапазонов на релятивистском электронном пучке, распространяющемся навстречу, можно использовать для преобразования оптического излучения в рентгеновский диапазон частот.

**Примечание.** Данную задачу можно решить и иначе. Перейдем в систему отсчета, где электрон покоится. В этой системе отсчета в результате эффекта Доплера частота фотона смещается в фиолетовую часть спектра:

$$\omega_c = \omega\gamma(1 + v/c) \approx 2\gamma\omega.$$

Здесь  $v$  – скорость электрона,  $\gamma = 1/\sqrt{1 - v^2/c^2} = E/mc^2 \approx 4 \cdot 10^4$  – релятивистский фактор. В собственной системе отсчета энергия кванта  $\hbar\omega_c \approx 4 \cdot 10^3 \text{ эВ} \ll mc^2$ . Поэтому частота света, рассеянного назад есть

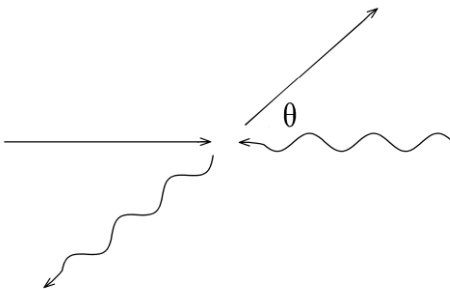
$$\omega_c^* \approx \omega_c(1 - 2\hbar\omega_c/mc^2) \approx \omega_c.$$

В лабораторной системе в результате эффекта Доплера происходит повышение частоты, поэтому наблюдаемая частота есть

$$\hbar\omega' \approx 2\gamma\omega_c^* = 4\gamma^2\hbar\omega,$$

что соответствует полученному ранее решению.

**1.15(15).** Фотон рассеивается на движущемся ему навстречу электроне. С какой скоростью должен двигаться электрон, чтобы частота фотона при рассеянии не изменилась?



**Решение**

Пусть  $v_0$  – начальная скорость электрона,  $\omega_0$  – начальная частота фотона. Из условия задачи (см. рисунок) ясно, что в рассматриваемом случае вне зависимости от угла рассеяния  $\theta$  начальные импульсы фотона и электрона по абсолютной величине равны друг другу, так что полный импульс системы равен нулю. Поэтому

$$\hbar \frac{\omega_0}{c} = m \frac{v_0}{\sqrt{1 - v_0^2/c^2}},$$

откуда находим

$$v_0 = \frac{c}{\sqrt{1 + (mc^2/\hbar\omega_0)^2}}.$$

В частности, в нерелятивистском случае имеем  $v_0 \approx \hbar\omega/mc$ .

## Глава 2. Волны де Бройля и соотношения неопределённостей. Атом Бора

1. Соотношения де Бройля:

$$\vec{p} = \hbar \vec{k}, \quad E = \hbar \omega, \quad \lambda_D = \frac{h}{p} = \frac{2\pi\hbar}{p},$$

где  $\lambda_D$  – длина волны, соответствующая частице, движущейся с импульсом  $\vec{p} = m\vec{v} / \sqrt{1 - (v/c)^2}$ , в частности, в нерелятивистском случае  $\vec{p} = m\vec{v}$ .

2. Соотношения неопределённостей для импульса и координаты частицы:

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

для энергии и времени

$$\Delta E \cdot \tau \geq \hbar.$$

3. Условие частот Бора

$$\hbar \omega_{mn} = E_m - E_n,$$

где  $\omega_{mn}$  – частота перехода  $m \rightarrow n$ ;  $E_m$ ,  $E_n$  – энергии уровней с квантовыми числами  $m$  и  $n$ .

4. Комптоновская длина волны:

$$\text{электрона } \Lambda_e = h/mc = 2\pi\hbar/mc \approx 2.42 \cdot 10^{-10} \text{ см},$$

$$\text{протона } \Lambda_p = 2\pi\hbar/m_p c \approx \Lambda_e/1836 \approx 1.31 \cdot 10^{-13} \text{ см}.$$

5. Формула Бальмера. Спектральные серии водородоподобного иона в предположении бесконечной массы ядра:

$$\frac{1}{\lambda_{mn}} = Z^2 R_\infty \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right).$$

Здесь  $\lambda_{mn}$  – длина волны для перехода  $m \rightarrow n$ ;  $Z$  – заряд ядра;

$$R_\infty = 109737.31568549 \text{ см}^{-1} \text{ – постоянная Ридберга.}$$

Спектральные серии:

- $n = 1$  – серия Лаймана,
- $n = 2$  – серия Бальмера,
- $n = 3$  – серия Пашена,
- $n = 4$  – серия Брэкета.

### Задачи

**2.1(16).** На какую кинетическую энергию должен быть рассчитан ускоритель протонов, чтобы исследовать структуры с пространственным размером  $\ell = 1 \text{ Фм} = 10^{-13} \text{ см}$ ?

### Решение

Чтобы можно было исследовать структуры с характерным размером  $\ell$ , необходимо ускорить частицы до энергий, при которых их длина волны будет соизмерима с исследуемыми масштабами. Поэтому необходимую энергию можно найти из условия  $\lambda_D \leq \ell$ .

Сразу определимся, имеем ли мы дело здесь с релятивистским случаем, или же можно пользоваться классическими формулами. Для этого достаточно оценить дебройлевскую длину волны протона с кинетической энергией  $T$ , сравнимой с его энергией покоя:

$$\lambda_D = \frac{h}{p} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_p T}} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_p^2 c^2}} \approx 0.93 \cdot 10^{-13} \text{ см.}$$

Эта оценка показывает, что протон лишь в релятивистском случае может обладать требуемой длиной волны.

Используя релятивистскую связь энергии и импульса, находим:

$$T = E - m_p c^2 = \sqrt{p^2 c^2 + m_p^2 c^4} - m_p c^2,$$

для требуемой энергии находим:

$$T \geq m_p c^2 \left( \sqrt{(2\pi\hbar/m_p c \ell)^2 + 1} - 1 \right).$$

Учитывая, что  $\Lambda_p = 2\pi\hbar/m_p c$  - комптоновская длина волны протона, полученное выражение удобно переписать в виде:

$$T \geq m_p c^2 \left( \sqrt{(\Lambda_p/\ell)^2 + 1} - 1 \right) \approx 0.65 m_p c^2 \approx 600 \text{ МэВ.}$$

Конечно, в общем случае всегда можно сразу решать задачу с использованием релятивистских выражений без проведения предварительных оценок, однако, всегда полезно сразу представлять себе, о каком именно случае идет речь.

**2.2(17).** В электронном микроскопе энергия пучка электронов  $T = 100 \text{ кэВ}$ . Определить его предельно возможную разрешающую способность.



### Решение

Предельная разрешающая способность такого микроскопа по порядку величины равна длине волны де Бройля, которой обладают электроны. В этой задаче сразу понятно, что речь идет о слаборелятивистском случае, поэтому можно использовать классическую нерелятивистскую формулу для связи кинетической энергии и импульса. Однако, постараемся сделать наши вычисления точнее и учесть релятивистскую поправку. Тогда:

$$\ell \sim \lambda_D = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{E^2 - m^2c^4}} = \frac{2\pi\hbar c}{\sqrt{(T + mc^2)^2 - m^2c^4}} \approx \frac{2\pi\hbar c}{\sqrt{2Tmc^2 + T^2}}.$$

С учетом  $mc^2 > T$  можно написать:

$$\ell \sim \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2mT}} \left( \frac{1}{\sqrt{1 + T/2mc^2}} \right) \approx \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2mT}} \left( 1 - T/4mc^2 \right),$$

откуда

$$\ell \sim 0.95 \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2mT}} \approx 1.2 \cdot 10^{-10} \text{ см.}$$

**2.3(18).** Определить фазовую и групповую скорости волн де Бройля для релятивистской частицы.

### Решение

Согласно гипотезе де Бройля  $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ . Если предположить в дополнение к этому еще и условие для энергии в виде  $E = \hbar\omega$ , то по аналогии с электромагнитными волнами можно говорить о фазовой и групповой скоростях волн де Бройля:

$$v_{ph} = \frac{\omega}{k}, \quad v_g = \frac{d\omega}{dk}.$$

Используя релятивистские выражения для связи энергии с импульсом частицы, получим:

$$v_{ph} = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{p} = \frac{\gamma mc^2}{\gamma mv} = \frac{c^2}{v}. \quad (1)$$

Здесь  $\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$  – релятивистский фактор. Естественно, тот факт, что

фазовая скорость (т. е. скорость движения фазы волны де Бройля) в наших расчетах превышает скорость света, сам по себе ничем не страшен – эта

скорость не есть скорость перемещения энергии, а значит, никакие фундаментальные принципы не нарушаются.

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{dp} = \frac{pc^2}{E} = v.$$

А вот групповая скорость волны де Бройля совпадает с «обычной» скоростью перемещения частицы. Этот факт представляет собой дополнительный аргумент в пользу рассмотрения движения частиц в качестве волнового процесса в пространстве.

Эту задачу в нерелятивистской области можно решить и иначе: используя соотношение  $E = p^2/2m$  или  $\hbar\omega = \hbar^2 k^2/2m$ , находим

$$v_{ph} = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{p} = v/2, \quad (2)$$

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{dp} = v.$$

Важно, что групповая скорость волны, т. е. скорость перемещения в пространстве пакета, как единого образования, не изменилась.

Отметим, что в нерелятивистском пределе полученное общерелятивистское выражение (1) для фазовой скорости не переходит в выражение (2). Так получилось потому, что в выражении  $E = \hbar\omega$  в одном случае мы имели в виду кинетическую энергию, а в другом случае полную энергию частицы (кинетическую плюс энергию покоя). Из приведённого примера видно, что понятие частоты волны де Бройля может быть введено неоднозначно. Физическое содержание теории от этого не меняется.

**2.4(19).** Определить длины волн де Бройля для электронов и протонов с энергией  $E = 10$  МэВ.

### Решение

Заметим, прежде всего, электрон с энергией 10 МэВ является ультра-релятивистским, поэтому приближенно энергия с импульсом связаны соотношением  $E = pc$ . При этом, не важно, является ли заданная энергия кинетической энергией, или полной энергией частицы. Поэтому для дебройлевской длины волны электронов:

$$\lambda_e = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{2\pi\hbar c}{E} \approx 1.2 \cdot 10^{-11} \text{ см.}$$

Наоборот, протоны с энергией 10 МэВ являются нерелятивистскими. При этом понятно, что в условии задачи речь идет о кинетической энергии протона. В этом случае для длины волны де Бройля запишем:

$$\lambda_p = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_p E}} \approx 0.9 \cdot 10^{-12} \text{ см.}$$

**2.5(20).** Электрон находится в бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме размером  $a \times b$ . Оценить минимально возможное значение кинетической энергии электрона в случаях: а)  $a = b = 1 \text{ \AA}$ , б)  $a = 1 \text{ \AA}$ ,  $b = 1 \text{ см}$ .

### Решение

Оценим минимально возможное значение энергии с помощью соотношения неопределённости. Для этого будем действовать следующим образом. Импульс частицы можно представить в виде суммы:

$$p_x = \langle p_x \rangle + \Delta p_x,$$

$$p_y = \langle p_y \rangle + \Delta p_y,$$

где первые слагаемые представляют собой некоторые усредненные значения проекций импульса<sup>1</sup>, а вторые слагаемые – их неопределённости. Кинетическая энергия частицы  $T = p^2/2m = (p_x^2 + p_y^2)/2m$ . Минимальное значение этой величины, очевидно, соответствует случаю  $\langle p_x \rangle = \langle p_y \rangle = 0$ .

Тогда получим:

$$T_{\min} = ((\Delta p_x)^2 + (\Delta p_y)^2)/2m.$$

Из соотношения неопределённости:

$$\Delta p_x \sim \hbar/a \text{ и } \Delta p_y \sim \hbar/b.$$

Тогда для оценки минимальной кинетической энергии имеем:

$$T_{\min} = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{a^2} + \frac{1}{b^2} \right).$$

Подставляя численные значения для случая а), получаем значение

$$T_{\min} = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{2}{a^2} \right) \approx 7.6 \text{ эВ.}$$

В случае б) ограничение движения по второй оси координат фактически отсутствует,  $b$  представляет собой макроскопическую величину. Это приводит к тому, что и неопределённость проекции импульса (а значит и

---

<sup>1</sup> При этом здесь даже не так важно, какова природа этого усреднения. В следующей главе мы познакомимся с усреднением по квантовому состоянию – в идеале именно оно имеется здесь в виду.

добавка к кинетической энергии), связанная с этим направлением, крайне мала. Так что вклад в минимальную кинетическую энергию дает только лишь ограничение движения по первой оси.

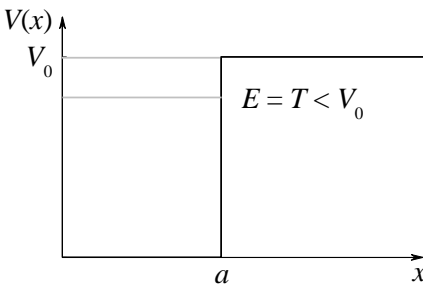
$$T_{\min} \cong \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{a^2} \right) \approx 3.8 \text{ эВ.}$$

Как видно, ограничение области пространственного движения частицы (в размере  $a$ ) приводит к чисто квантовой добавке к кинетической энергии порядка величины  $\hbar^2/2ma^2$ . Для ангстремного размера области локализации, получаем, что кинетическая энергия электрона не может быть меньше нескольких электронвольт. Поскольку атом имеет размер порядка одного ангстрема, энергия электрона в нем составляет несколько электронвольт. Аналогично, поскольку размер атомного ядра порядка 1 Фм ( $10^{-13}$  см), энергия нуклона в ядре оказывается порядка 1 МэВ. В этом смысле в микромире пространственные и энергетические масштабы оказываются жестко связанными между собой.

**2.6(21).** Исходя из соотношения неопределённости, получить условие, при выполнении которого частица массы  $m$  может удерживаться в прямоугольной сферически симметричной потенциальной яме радиуса  $R$  и глубины  $V_0$ .

### Решение

Условие удержания частицы в потенциальной яме (см. рисунок) состоит в том, что яма является достаточно глубокой, т. е. ее глубина  $V_0$



превышает величину хотя бы минимальной кинетической энергии  $T_{\min}$ . Поскольку

$$T_{\min} \sim \hbar^2/2mR^2,$$

то условие удержания имеет вид:

$$\frac{\hbar^2}{2mR^2} < V_0 \Rightarrow \frac{2mV_0R^2}{\hbar^2} > 1.$$

Отметим, что полученное условие с точностью до множителя порядка единицы совпадает с точным квантовомеханическим решением задачи. В рамках квантовомеханического формализма рассматриваемая проблема исследуется в задаче 3.19.

**2.7(22).** Ширина линии усиления кристалла титаната сапфира (*Ti: Sapphire*) составляет  $\Delta\nu = 2 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}$ . Оценить предельную длительность импульса генерации в лазере на кристалле титаната сапфира.

### Решение

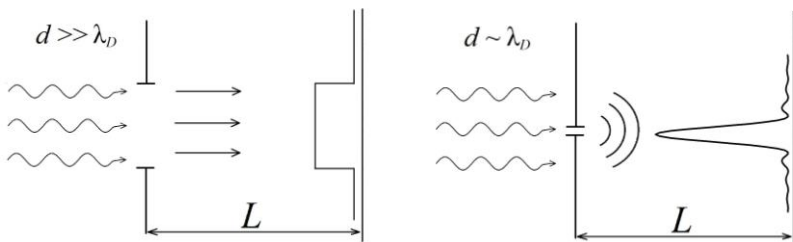
Ширина линии усиления лазера задает ширину спектра излучаемого лазерного импульса, т.е. расстояние между крайними усиливаемыми (а значит и генерируемыми) частотами. Ширина спектра и предельно короткая длительность импульса связаны между собой соотношением  $\Delta\nu \tau \sim 1$ . Тогда

$$\tau \sim 1/\Delta\nu = 5 \cdot 10^{-15} \text{ с} = 5 \text{ фс.}$$

Обычно импульсы такой длительности получаются путем синхронизации различных мод лазерного излучения. На данный момент экспериментально удалось получить импульсы рекордно короткой длительности, близкой к фундаментальному пределу в один цикл колебаний поля.

**2.8(23).** Пучок атомов водорода со скоростью  $v = 10^7 \text{ см/с}$  падает нормально на экран с узкой щелью, за которой на расстоянии  $L = 1 \text{ м}$  находится непрозрачный экран. Оценить ширину щели, при которой размер пятна на экране является минимальным.

### Решение



На первый взгляд задача может показаться несколько странной и не имеющей смысла, так как мы привыкли к «корпускулярному взгляду» на частицы. В соответствии с этим взглядом в отсутствие внешнего воздействия частицы летят по прямой и размер пятна на экране просто равен размеру щели (см. левый рисунок).

На самом деле, как мы знаем, частицы могут проявлять в том числе и волновые свойства, а размер пятна на экране будет определяться дифракцией (см. правый рисунок). Это происходит в том случае, когда размер препятствия соотносим с дебройлевской длиной волны частиц.

Итак, пусть размер щели  $d$ . Это означает, что первый дифракционный минимум в дифракционной картине будет наблюдаться под углом

$\theta \cong \frac{\lambda_D}{2d}$ , а значит, размер пятна на экране будет составлять:

$$l = d + 2L\lambda_D/2d.$$

Минимизируя по ширине входной щели, получим:

$$d_{\min} = \sqrt{L\lambda_D}.$$

Полезно получить также численное значение оцениваемой величины:

$$d_{\min} = \sqrt{L2\pi\hbar/mv} \approx 2 \cdot 10^{-4} \text{ см.}$$

У этой задачи существует еще одно красивое решение, основанное на соотношении неопределённости, а именно: можно рассматривать пролет пучка частиц через щель как ограничение поперечного движения в пучке. Согласно соотношению неопределённости это должно привести к появлению поперечной неопределённости в импульсе порядка  $p_y \sim \hbar/d$ , а значит и к размытию изображения щели на экране на величину порядка

$\Delta l \sim 2 \frac{L}{v} \cdot \frac{\hbar}{md}$ . Ответ при такой оценке также получится вполне разумным,

а если взять соотношение неопределённости в виде  $\Delta p \Delta x \geq \hbar/2$ , то он точно совпадет с полученным ранее.

**2.9(24).** Взаимодействие ядра (с зарядом  $Z$ ) с электроном описывается законом Кулона  $V(r) = -Ze^2/r$ . В квантовой электродинамике это взаимодействие – результат обмена (испусканием одной частицей и поглощением другой) фотонами. Отклонение от закона Кулона возникает в результате превращения фотона в виртуальную электрон-позитронную пару. Исходя из соотношения неопределённости, оценить пространственный размер, на котором происходит нарушение закона Кулона.

### Решение

Рождение фотоном электрон-позитронной пары предполагает «нарушение» закона сохранения энергии, которое в соответствии с соотношением неопределённости энергия–время, может происходить не больше, чем на временах, определяемых из условия  $\Delta E \tau \sim \hbar$ , где  $\Delta E \sim 2mc^2$  – энергия виртуальной электрон-позитронной пары. Эта пара может существовать

на временах, не больших чем  $\tau_{\max} \sim \hbar/m_e c^2$  (множителем «2» в знаменателе пренебрегаем, его учет был бы превышением точности). За это время пара может разлететься на расстояние порядка

$$R_{\max} \sim \frac{\hbar c}{m_e c^2} = \tilde{\lambda}_e,$$

где  $\tilde{\lambda}_e = \Lambda_e/2\pi = \frac{\hbar}{mc} \approx 3.86 \cdot 10^{-11}$  см,  $\Lambda_e$  – комптоновская длина волны

электрона. В результате, точечный заряд как бы одет «шубой» электрон-позитронных пар размером порядка комптоновской длины волны электрона и для стороннего наблюдателя оказывается как бы неточечным – размазанным по размеру порядка  $\tilde{\lambda}_e$ . Это обстоятельство и приводит к нарушению закона Кулона для силы взаимодействия между двумя точечными зарядами  $F \sim 1/r^2$  на расстояниях меньших комптоновской длины волны.

Отметим, что указанный размер существенно больше размера атомного ядра. Поэтому, с некоторой степенью условности, можно говорить о том, что атомный электрон «видит» ядро размера порядка  $\tilde{\lambda}_e$ , что приводит к сдвигу атомных уровней.

**2.10(25).** Последовательность длин волн линий в спектральной серии некоторого элемента определяется соотношением (серия Пикеринга)

$$\frac{1}{\lambda_n} = R \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n = 2.5; 3; 3.5; 4; \dots$$

Определить, что это за элемент и переходам между какими уровнями соответствует данная серия.

### Решение

Приведем данную формулу к стандартному выражению для закона Бальмера  $\frac{1}{\lambda_{mn}} = Z^2 R \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$ :

$$\frac{1}{\lambda_n} = R \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) = Z^2 R \left( \frac{1}{(2Z)^2} - \frac{1}{(Zn)^2} \right).$$

Минимальному значению  $Zn$  в последнем выражении должен соответствовать резонансный переход для данной спектральной серии, т.е.

$$2Z + 1 = Zn_{\min}.$$

Отсюда находим

$$Z = 2, \quad \frac{1}{\lambda_n} = 2^2 R \left( \frac{1}{4^2} - \frac{1}{m^2} \right), \text{ где } m = 5, 6, 7, \dots$$

Таким образом, речь идет о серии Брэкета в водородоподобном ионе гелия  $\text{He}^+$ . Эта серия знаменита тем, что она была обнаружена в спектре излучения Солнца и ошибочно приписана спектру атома водорода в соответствии с приведенным в условии задачи законом. При этом предполагалось, что на Солнце водород находится в особых условиях, при которых реализуются не только целые, но и полуцелые значения квантового числа  $n$ .

**2.11(26).** Воспользовавшись квантовым условием Бора, определить радиусы орбит и уровни энергий в центрально-симметричном силовом поле  $\vec{F} = -k\vec{r}$ . Орбиты считать круговыми.

### Решение

Представленная система является гармоническим осциллятором, естественно при этом ввести величину, соответствующую частоте осциллятора  $\omega = \sqrt{k/m}$ . В случае круговых орбит условие квантования момента импульса по Бору выглядит следующим образом:

$$mv_n r_n = n\hbar.$$

В качестве второго уравнения возьмем условие равенства между центростремительным ускорением и вызывающей его силой:

$$mv_n^2/r_n = kr.$$

Решая систему этих уравнений, получаем радиусы круговых орбит:

$$r_n^4 = \frac{m}{k} \left( \frac{n\hbar}{m} \right)^2 \Rightarrow r_n = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \sqrt{n}.$$

Здесь квантовое число  $n$  пробегает значения  $n = 0, 1, 2, \dots$

Уровни энергии в таком потенциальном поле

$$E_n = \frac{mv_n^2}{2} + \frac{kr_n^2}{2} = n\hbar\omega.$$

Мы получили, что спектр осциллятора соответствует представлениям Планка о полевой моде («осцилляторе поля»): ее энергия кратна величине  $\hbar\omega$ . Фактически, данная задача показывает, как можно от идеи квантования спектра осциллятора по Планку перейти к квантованию момента количества движения по Бору.

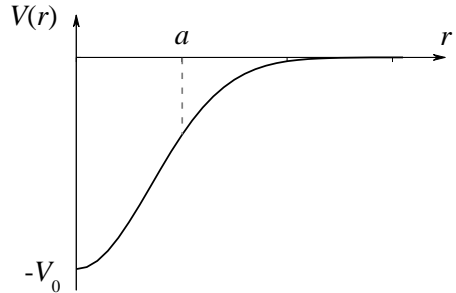
С точки зрения современной квантовой теории «правильный» ответ задачи надо записать так:

$$E_n = \hbar\omega(n + 1/2), \quad n = 0, 1, 2, \dots,$$



т.е. в состоянии с  $n=0$  минимальная энергия плоского (двумерного) осциллятора отлична от нуля и равна  $\hbar\omega$ .

**2.12(27).** Электрон движется по круговой орбите в центрально-симметричном потенциале,  $V(r) = -V_0 \exp(-r^2/a^2)$ ,  $V_0 > 0$ ,  $a$  – радиус действия потенциала (см. рисунок). В рамках модели Бора найти условие, при выполнении которого в яме существует хотя бы один уровень.



**Решение**

Вводя безразмерный радиус орбиты  $\xi_n = r_n/a$ , запишем уравнение движения в данном потенциале на  $n$ -ной круговой орбите в следующем виде:

$$\frac{mv_n^2}{\xi_n} = 2V_0 \xi_n \exp(-\xi_n^2).$$

Отсюда заключаем, что выражение для полной энергии частицы, движущейся в таком потенциале, запишется как

$$E_n = \frac{mv_n^2}{2} + V = V_0 a^2 (\xi_n^2 - 1) \exp(-\xi_n^2).$$

Связанным состояниям соответствует отрицательная полная энергия, поэтому для наличия хотя бы одного связанного состояния необходимо положить:

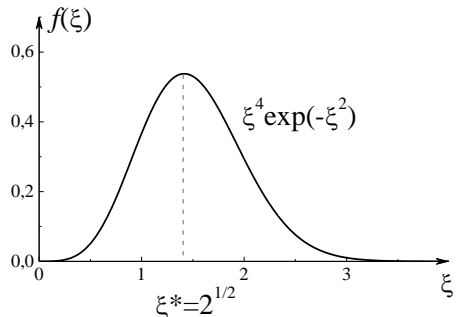
$$\xi_1^2 < 1.$$

Теперь рассмотрим уравнение для вычисления радиусов орбит частицы. В рамках модели Бора условие квантования для круговых орбит имеет вид:

$$mv_n r_n = n\hbar.$$

Тогда, используя полученные ранее формулы, получим:

$$\frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} \xi_n^4 \exp(-\xi_n^2) = n^2.$$



Последнее выражение является уравнением для определения  $\xi_n$ . В левой его части – функция, максимум которой находится в точке  $\xi^* = \sqrt{2}$ , а значит в области значений  $\xi_n$ , которая нас интересует ( $\xi_1^2 < 1$ ), левая часть уравнения является монотонной функцией. Тогда видно, что необходимое условие, при котором энергия является отрицательной, удовлетворяется при глубине потенциала, превосходящей некое пороговое значение  $V_0^*$ . Пороговое значение глубины легко получить, положив  $\xi_1^2 = 1$ . Получим:

$$\frac{2mV_0^*a^2}{\hbar^2} = e \approx 2.71828\dots$$

Условие на наличие, по крайней мере, одного уровня в таком потенциале приобретает вид:

$$V_0 > V_0^* = 2.71828\dots \frac{\hbar^2}{2ma^2}.$$

Нетрудно видеть, что аналогичный же результат легко получается в виде оценки на основе соотношения неопределённостей (см. задачу 2.6).

**2.13(28).** В рамках модели атома Бора показать, что водородоподобный ион с зарядом ядра  $Z > Z^* = 137$  не существует. Ограничиться случаем круговых орбит.

### Решение

В нерелятивистской модели Бора скорость электрона определяется соотношением  $v_n = \alpha c \frac{Z}{n}$ , где  $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$  – постоянная тонкой структуры. Это говорит о том, что для атомов с  $Z \sim 137$  скорость электрона на первой боровской орбите будет достигать значений, сравнимых с величиной скорости света. А это значит, что нам придется рассмотреть в данной задаче релятивистское обобщение модели Бора. Построим его.

Условие квантования Бора примет вид:

$$\gamma m v_n r_n = n \hbar.$$

Здесь  $\gamma = 1/\sqrt{1-v^2/c^2}$  – релятивистский фактор.

Рассмотрение только круговых орбит позволяет получить еще одно уравнение связи скорости и радиуса орбиты:

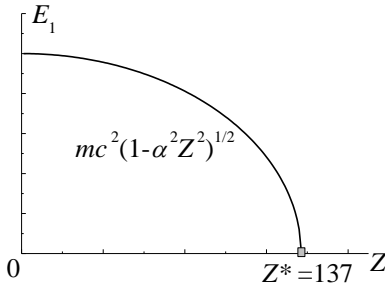
$$\left| \frac{d\vec{p}}{dt} \right| = \gamma m \left| \frac{d\vec{v}}{dt} \right| = \gamma m \frac{v^2}{r} = \frac{Ze^2}{r^2}.$$

Полная энергия электрона в поле ядра запишется как

$$E = \gamma mc^2 - Ze^2/r = \gamma mc^2 - \gamma mv^2 = mc^2 \sqrt{1 - v^2/c^2}.$$

Решая систему относительно  $v_n$  и  $r_n$ , получаем:

$$r_n = a_0 \frac{n^2}{Z} \sqrt{1 - \alpha^2 Z^2/n^2}, \quad v_n = \alpha c Z/n, \quad E_n = mc^2 \sqrt{1 - \alpha^2 Z^2/n^2}.$$



Полученная зависимость энергии основного состояния от заряда ядра представлена на рисунке.

Таким образом, релятивистское обобщение модели Бора вовсе не решает «проблему» превышения скорости света. Более того, в рамках такого обобщения неизбежно получается, что радиус первой орбиты при условии  $Z > Z^* = 137$  становится чисто мнимым, а полная

энергия (включающая энергию покоя) – отрицательной. Оба этих вывода позволяют заключить, что атомы с таким большим зарядом ядра просто не существуют, т. е. модель Бора предсказывает существование конечного числа элементов в таблице Менделеева.

Результаты, основанные на точном квантовомеханическом расчете в рамках релятивистской теории Дирака, дают аналогичный результат. Учет в квантовой теории конечного размера атомного ядра приводит к увеличению критического заряда до значения  $Z^* = 172$ .

**2.14(29).** Определить релятивистскую поправку и поправку, связанную с учетом конечной массы ядра к потенциалу ионизации водородоподобного иона с зарядом ядра  $Z$ . Считать, что орбиты являются круговыми, а число протонов в ядре равно числу нейтронов.

### Решение

Начнем с поиска релятивистской поправки. В задаче 2.13 нам удалось построить релятивистское обобщение модели Бора. Уровни энергии за вычетом энергии покоя описываются соотношением:

$$E_n = mc^2 \left( \sqrt{1 - \alpha^2 Z^2/n^2} - 1 \right).$$

В нерелятивистском пределе  $\alpha Z \ll 1$ , поэтому, раскладывая корень в ряд, получаем:

$$E_n = mc^2 \left( -\frac{\alpha^2 Z^2}{2n^2} - \frac{1}{8} \left( \frac{\alpha^2 Z^2}{n^2} \right)^2 \right) = -Ry \frac{Z^2}{n^2} - \frac{1}{4} Ry \alpha^2 \frac{Z^4}{n^4}.$$

Таким образом, поправка к энергии всех уровней отрицательна и имеет порядок  $\alpha^2 Z^4 Ry$ , т. е. возрастает с ростом заряда ядра водородоподобного иона. Еще один важный результат – это возможность трактовать величину  $(\alpha Z)^2$  как некоторый малый параметр разложения релятивистских формул в нерелятивистском приближении. Именно малость этой величины обеспечивает возможность такого разложения. Релятивистская поправка к потенциалу ионизации составляет  $\delta I_{rel} = \frac{1}{4} Ry \alpha^2 Z^4$ .

Теперь найдем поправку, связанную с конечной массой атомного ядра, т. е. опишем так называемый изотопический эффект – разность положения уровней энергии для различных изотопов одного и того же вещества. При последовательном рассмотрении задачи о водородоподобном ионе мы не можем рассматривать ядро, как бесконечно тяжелое и неподвижное. Впрочем ситуация в классической механике легко исправляется путем перехода к рассмотрению движения вокруг центра масс фиктивной частицы приведенной массы. Т. е. учет конечной массы ядра приведет к замене во всех формулах массы электрона на приведенную массу  $\mu = \frac{mM}{m+M}$  ( $M$  – масса ядра):

$$E_n = -Ry \frac{Z^2}{n^2} \frac{\mu}{m} = -Ry \frac{Z^2}{n^2} \frac{1}{1+m/M} \approx -Ry \frac{Z^2}{n^2} \left( 1 - \frac{m}{M} \right).$$

Учет конечной массы ядра также приводит к сдвигу уровней энергии вверх по шкале, т. е. ведет к уменьшению потенциала ионизации. Впрочем, зависимость от заряда ядра и номера энергетического уровня в данном случае совершенно иная. Для потенциала ионизации  $\delta I_M = Ry Z^2 (m/M)$ . Пользуясь предложенным в условии предположением о нуклонном составе ядра, можно переписать последнее выражение через заряд ядра:

$$\delta I_M = Ry Z (m / (M_p + M_n)) \approx Ry Z (m / 2M_p).$$

Можно также определить заряд ядра, при котором поправки равны по величине между собой:  $Z = \sqrt[3]{\frac{2m_e}{\alpha^2 M_p}} \approx 2.7$ . Таким образом, для всех водо-

родоподобных ионов, кроме ионов первых двух элементов доминирующей является релятивистская поправка, однако для возбужденных состояний зачастую важнее учитывать эффект конечности массы ядра.

**2.15(30).** Квантование в макроскопической системе. Искусственный спутник массой  $m = 100$  кг движется по круговой орбите на высоте  $H = 100$  км над поверхностью Земли. В рамках модели Бора оценить номер квантового числа, соответствующего движению по такой орбите. Определить изменение радиуса орбиты при изменении квантового числа на величину  $\Delta n \cong 1$ .

### Решение

Закон всемирного тяготения отличается от закона Кулона только константой связи (гравитационная постоянная вместо единицы) и заменой зарядов на массы. Зависимость от расстояния для обоих видов взаимодействия одинакова. Значит все формулы, полученные в «стандартной» модели Бора для водородоподобного иона, будут справедливы и здесь с соответствующей заменой.

Тогда можем сразу написать  $r_n = \frac{\hbar^2}{Gm^2M} n^2$  (здесь  $M \approx 5.97 \cdot 10^{27}$  г – масса Земли). Отсюда можно выразить «квантовое число», соответствующее движению спутника по орбите:

$$n = \sqrt{\frac{Gm^2Mr}{\hbar^2}} = \frac{m}{\hbar} \sqrt{GM(R+H)} \approx 5 \cdot 10^{46},$$

где  $R \approx 6370$  км – радиус Земли. При этом изменение радиуса орбиты при изменении квантового числа на единицу описывается соотношением:

$$\Delta r_n = \frac{\hbar^2}{Gm^2M} [(n+1)^2 - n^2] \approx 2 \frac{\hbar^2}{Gm^2M} n = 2 \frac{r_n}{n} \approx 2.6 \cdot 10^{-38} \text{ см.}$$

Эта величина не только на многие порядки меньше тех, что доступны современной экспериментальной технике, но и настолько мала, что мы на данный момент не обладаем какими-либо знаниями относительно законов физики в системах таких размеров.

### Глава 3. Основы квантовой теории

1. Состояние микросистемы характеризуется волновой функцией  $\psi(\vec{r}, t)$ . Величина  $\psi(\vec{r}, t)$  есть вероятность обнаружить частицу в объеме  $d^3r$  вблизи точки с координатой  $\vec{r}$  в момент времени  $t$ .
2. Волновая функция, описывающая какое-либо состояние частицы, нормирована согласно условию

$$\int |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r = 1.$$

3. Эволюция состояния во времени определяется нестационарным уравнением Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t).$$

Здесь  $V(\vec{r}, t)$  – внешнее потенциальное поле (в общем случае нестационарное), в котором движется частица.

4. В квантовой механике каждой физической величине  $A$  по некоторому закону ставится в соответствие оператор  $\hat{A}$ . Измеряемые в эксперименте значения величины  $A$  принадлежат спектру собственных значений оператора  $\hat{A}$ .

5. Среднее значение и дисперсия величины  $A$  в состоянии  $\psi(\vec{r}, t)$ :

$$\langle A \rangle = \int \psi^*(\vec{r}, t) \cdot \hat{A} \psi(\vec{r}, t) d^3r,$$
$$D_A = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2.$$

6. Операторы некоторых физических величин:

координаты  $\hat{r} = \vec{r}$ , т. е.  $\hat{r} \psi(\vec{r}, t) = \vec{r} \psi(\vec{r}, t)$ ;

импульса  $\hat{p} = -i\hbar \nabla$ , т. е.  $\hat{p} \psi(\vec{r}, t) = -i\hbar \nabla \psi(\vec{r}, t)$ ;

момента импульса  $\hat{L} = [\hat{r} \times \hat{p}] = -i\hbar [\vec{r} \times \nabla]$ ;

квадрата момента импульса  $\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 = -\hbar^2 \Delta_{\theta\varphi}$ ,

( $\Delta_{\theta\varphi}$  – угловая часть оператора Лапласа);

$z$ -проекция момента импульса (в сферической системе координат)

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi};$$

кинетической энергии  $\hat{T} = \hat{p}^2 / 2m = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$ ;

потенциальной энергии  $\hat{V}(\vec{r}, t) = V(\vec{r}, t)$ ;

полной энергии (гамильтониан)  $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r}, t)$ .

7. Коммутатором  $[\hat{A}, \hat{B}]$  двух операторов  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  называется оператор  $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ .

8. Стационарное уравнение Шредингера (дискретный энергетический спектр):

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\varphi_n(\vec{r}) + V(\vec{r})\varphi_n(\vec{r}) = E_n\varphi_n(\vec{r}),$$

где  $E_n$  – энергия стационарного состояния, а потенциал  $V(\vec{r})$  полагается независимым от времени.

Общий вид волновой функции, описывающей эволюцию стационарного состояния во времени:

$$\psi(\vec{r}, t) = \varphi_n(\vec{r}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_n t\right),$$

где  $\varphi_n(\vec{r})$  – координатная часть волновой функции.

9. Волновая функция произвольного состояния системы  $\psi(\vec{r})$  может быть представлена в виде линейной комбинации стационарных состояний системы

$$\psi(\vec{r}) = \sum_n C_n \varphi_n(\vec{r}).$$

10. Энергетические уровни и волновые функции стационарных состояний одномерного гармонического осциллятора:

$$E_n = \hbar\omega(n + 1/2), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

$$\varphi_n(x) = N_n H_n(x/a) \exp\left(-\frac{1}{2}(x/a)^2\right),$$

где  $a = \sqrt{\hbar/m\omega}$ ,  $H_n(\zeta)$  – полином Эрмита,  $N_n = (2^n n! a \sqrt{\pi})^{-1/2}$  – нормировочная константа.

### Задачи

**3.1(31).** Исходя из предположения, что свободной частице с импульсом  $\vec{p}$  соответствует плоская волна с волновым вектором  $\vec{k} = \vec{p}/\hbar$  (гипотеза де Бройля) и частотой  $\omega = E/\hbar$  ( $E = p^2/2m$ ), получить нерелятивистское волновое уравнение, описывающее свободное движение частицы.

### Решение

Найдем дисперсионное соотношение (т. е. связь между частотой и волновым вектором) для волн де Бройля. Энергия и импульс классической частицы связаны между собой известным образом:

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2).$$

Используя заданные в условии соотношения между волновым вектором и импульсом (гипотеза де Бройля), а также между частотой и энергией волн де Бройля, получим:

$$\omega = \frac{\hbar}{2m}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$$

– искомый вид закона дисперсии в нерелятивистском пределе.

Сам вид дисперсионного соотношения позволит нам «угадать» вид нерелятивистского волнового уравнения, описывающего движение квантовой частицы в свободном пространстве. Действительно, если частице соответствует плоская волна в виде  $\psi = A \exp(i(\vec{k}\vec{r} - \omega t))$ , то простым дифференцированием находим:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -i\omega\psi \quad \text{и} \quad \frac{\partial^2 \psi}{\partial r_i^2} = -k_i^2\psi, \quad \text{где } i = \{x, y, z\}.$$

Выражая  $\omega$  и  $k_i$  из двух последних равенств, получим, что для выполнения установленного закона дисперсии необходимо выполнение равенства:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi.$$

Здесь есть и другая возможность: чтобы получить  $k_i^2$ , можно поступить иначе – один раз продифференцировать функцию  $\psi = A \exp(i(\vec{k}\vec{r} - \omega t))$  по пространственной координате и составить конструкцию вида

$$\sum_i k_i^2 = -\frac{1}{\psi^2} \sum_i \left( \frac{\partial \psi}{\partial x_i} \right)^2,$$

что приведет нас к волновому уравнению вида

$$i\hbar \psi \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \left( \frac{\partial \psi}{\partial x_i} \right)^2.$$

В качестве замечания к данной задаче стоит отметить, что исторически сам де Бройль выдвигал гипотезу лишь о связи импульса



частицы с соответствующим волновым вектором. При этом соотношение между частотой и энергией им никак не конкретизировалось.

**3.2(32).** Используя выражение для релятивистской связи энергии и импульса  $E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4$ , в условиях предыдущей задачи найти релятивистское волновое уравнение, описывающее движение свободной частицы.

### Решение

Эта задача отличается от предыдущей только релятивистской связью между энергией и импульсом свободной частицы. Это означает, что действуя по той же схеме, что и в предыдущей задаче, мы получим иной вид дисперсионного соотношения:

$$\frac{\omega^2}{c^2} = (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2}.$$

Дисперсионное соотношение приняло принципиально иной вид. В нерелятивистском пределе связь частоты и волнового вектора носит квадратичный характер, а здесь в пределе больших волновых векторов ( $\hbar k \gg mc$ ) имеем линейное соотношение между ними (линейный закон дисперсии соответствует также свободному электромагнитному полю).

Как и в предыдущей задаче исходя из соображений линейности конечного уравнения, частоту и волновой вектор с помощью дифференцирования и подставляя полученные выражения в дисперсионное соотношение, находим:

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = \nabla^2 \psi - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \psi.$$

Полученное уравнение называется уравнением Клейна – Гордона.

В частном случае  $m = 0$  (безмассовые частицы) получаем «обычное» волновое уравнение, как в теории электромагнитного поля. Отметим только, что наше поле  $\psi(\vec{r}, t)$  является скалярным, а в теории электромагнитного поля волновое уравнение записывается для векторной функции – векторного потенциала  $\vec{A}(\vec{r}, t)$ .

**3.3(33).** Волновая функция частицы в некоторый момент времени определяется выражением

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{\pi}}} \cdot \exp(ik_0 x) \cdot \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2a^2}\right).$$

Определить средние значения и дисперсии координаты и импульса частицы в этом состоянии.

### Решение

Средние значения и дисперсии координаты и импульса в данный момент времени для состояния, характеризуемого с помощью заданной волновой функции, вычисляются по формулам 5 (см. введение к гл. 3). Для начала проведем вычисления для координаты:

$$\langle x \rangle = \int \psi^*(x) \cdot x \psi(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{a\sqrt{\pi}} x \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{a^2}\right) dx.$$

В последнем интеграле удобно перейти к переменной  $\xi = x - x_0$ . Тогда среднее значение координаты переписывается в виде:

$$\langle x \rangle = \frac{a}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \xi \exp\left(-\xi^2/a^2\right) d\xi + \frac{x_0}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\xi^2/a^2\right) d\xi.$$

Первый интеграл равен нулю в силу нечетности подынтегральной функции, а второй легко вычисляется с использованием интеграла Пуассона

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi}.$$

В итоге получаем  $\langle x \rangle = x_0$ , т. е. данное состояние описывает частицу, локализованную вблизи точки с координатой  $x_0$ .

Для нахождения дисперсии координаты нам понадобится вычислить интеграл

$$\langle x^2 \rangle = \int \psi^*(x) x^2 \psi(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{a\sqrt{\pi}} x^2 \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{a^2}\right) dx.$$

Делая замену переменной  $\xi = (x - x_0)/a$ , перепишем выражение в виде:

$$\langle x^2 \rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} (a\xi + x_0)^2 \exp\left(-\xi^2\right) d\xi = \frac{a^2}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \xi^2 \exp\left(-\xi^2\right) d\xi + x_0^2.$$

Полученный интеграл можно вычислить, например, так: делая замену переменной  $t = \xi^2$ , получим

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \xi^2 \exp\left(-\xi^2\right) d\xi = 2 \int_0^{+\infty} \xi^2 \exp\left(-\xi^2\right) d\xi = \int_0^{+\infty} \sqrt{t} \exp(-t) dt = \Gamma(3/2),$$

где  $\Gamma(p) = \int_0^{\infty} x^{p-1} \exp(-x) dx$  – Г-функция Эйлера. Вспомоная, что

$\Gamma(p+1) = p\Gamma(p)$  и  $\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}$ , окончательно для среднего квадрата координаты получим  $\langle x^2 \rangle = x_0^2 + a^2/2$ . Следовательно, для дисперсии координаты:

$$D_x = a^2/2.$$

Проведем теперь вычисления для импульса. Для среднего значения импульса имеем

$$\begin{aligned} \langle p \rangle &= \int \psi^*(x) \cdot \hat{p} \psi(x) dx = \\ &= \frac{\hbar k_0}{a\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-(x-x_0)^2/a^2) dx - \frac{1}{a\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{x-x_0}{a^2} \exp(-(x-x_0)^2/a^2) dx. \end{aligned}$$

Второй интеграл в последней сумме равен нулю в силу нечетности подынтегральной функции относительно точки  $x = x_0$ . А первый мы уже вычисляли. В результате

$$\langle p \rangle = \hbar k_0,$$

т. е. указанный волновой пакет описывает частицу со средним импульсом  $\langle p \rangle = \hbar k_0$ .

Точно так же, но быть может, чуть более трудоемко вычисляется среднее значение квадрата импульса:

$$\begin{aligned} \langle p_x^2 \rangle &= \int \psi^*(x) \cdot \hat{p}^2 \psi(x) dx = \frac{1}{a\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ik_0x} (-\hbar^2) \left[ (ik_0)^2 e^{ik_0x} \exp(-(x-x_0)^2/a^2) + \right. \\ &+ e^{ik_0x} 2(ik_0) \left( -(x-x_0)^2/a^2 \right) \exp(-(x-x_0)^2/a^2) + \\ &+ \left. e^{ik_0x} \left( (x-x_0)^2/a^2 \right) \exp(-(x-x_0)^2/a^2) - e^{ik_0x} \frac{1}{a^2} \exp(-(x-x_0)^2/a^2) \right] dx. \\ \langle p_x^2 \rangle &= \frac{\hbar^2}{a\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \left( k_0^2 + \frac{1}{a^2} \right) \exp(-(x-x_0)^2/a^2) dx - \\ &- \frac{\hbar^2}{a\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \left( (x-x_0)^2/a^2 \right) \exp(-(x-x_0)^2/a^2) dx. \end{aligned}$$

Второй интеграл несложно вычисляется (например, уже описанным методом сведения его к Г-функции). В результате имеем

$$\langle p_x^2 \rangle = \hbar^2 k_0^2 + \hbar^2/2a^2 \text{ и для дисперсии: } D_x = \hbar^2/2a^2.$$

Таким образом, имеем:

$$\langle x \rangle = x_0, \quad \langle p_x \rangle = \hbar k_0, \quad D_x = a^2/2, \quad D_x = \hbar^2/2a^2.$$

Пакет описывает частицу, локализованную вблизи точки с координатой  $x = x_0$  и движущуюся с импульсом (средним)  $\hbar k_0$ .

**Примечание.** Интегралы вида  $\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \exp(-\alpha x^2) dx$  можно вычислять и

методом дифференцирования по параметру. Рассмотрим интеграл

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-\alpha x^2) dx = \sqrt{\pi/\alpha}.$$

Дифференцируя по параметру  $\alpha$ , получим:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \exp(-\alpha x^2) dx = \sqrt{\pi}/(2\alpha^{3/2}).$$

**3.4(34).** Определить средние значения кинетической и потенциальной энергии в основном состоянии а) линейного гармонического осциллятора, б) атома водорода.

### Решение

а) Основное состояние гармонического осциллятора задается волновой функцией:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{\pi}}} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{x^2}{a^2}\right),$$

где  $a = \sqrt{\hbar/m\omega}$ , а гамильтониан его имеет вид:

$$H = T + V(x) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}.$$

Тогда  $\langle T \rangle = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m}$ , а  $\langle V \rangle = \frac{m\omega^2 \langle x^2 \rangle}{2}$ . Заметим, что средние значения квадрата импульса и квадрата координаты мы уже вычисляли в предыдущей задаче для аналогичного состояния. Можно использовать уже полученные результаты, положив в них  $k_0 = 0$  и  $x_0 = 0$ .

Имеем:

$$\langle T \rangle = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} = \frac{\hbar^2}{4ma^2} = \frac{\hbar\omega}{4} \text{ для кинетической энергии,}$$

$$\langle V \rangle = \frac{m\omega^2 \langle x^2 \rangle}{2} = \frac{m\omega^2 a^2}{4} = \frac{\hbar\omega}{4} \text{ для потенциальной энергии.}$$

б) Для атома водорода нормированная волновая функция основного состояния имеет вид:  $\psi = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} \exp(-r/a_0)$ , где  $a_0$  – борковский радиус.

Средние значения потенциальной и кинетической энергии электрона вычисляем по формулам:

$$\langle V \rangle = -\int |\psi(r)|^2 \frac{e^2}{r} d^3r = -\frac{e^2}{\pi a_0^3} \int r \exp(-2r/a_0) dr \int d\Omega = -\frac{e^2}{a_0} = -2Ry,$$

$$\begin{aligned} \langle T \rangle &= \int \psi(r) \hat{T} \psi(r) d^3r = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{1}{\pi a_0^3} \int r \exp(-2r/a_0) \frac{d^2}{dr^2} (r \exp(-2r/a_0)) dr \int d\Omega = \frac{e^2}{2a_0} = Ry. \end{aligned}$$

Отметим, что вычисленные средние значения удовлетворяют соотношению

$$\langle T \rangle = -\langle V \rangle / 2,$$

а полная энергия  $E = \langle T \rangle + \langle V \rangle = -\langle T \rangle = \langle V \rangle / 2$ .

Для обоих рассмотренных случаев выполняется некий аналог теоремы вириала: средние значения кинетической и потенциальной энергии связаны соотношением, зависящим от степени радиальной координаты в потенциальной энергии. Существенная разница состоит лишь в том, что в классической теореме вириала речь идет о средних по времени, а здесь – о средних по квантовому состоянию.

**3.5(35).** Показать, что гауссов волновой пакет минимизирует соотношение неопределенностей.

### Решение

Не ограничивая общности рассмотрения, остановимся на случае состояний, удовлетворяющих условиям  $\langle x \rangle = \langle p \rangle = 0$ . Рассмотрим неотрицательный функционал на множестве функций с интегрируемым квадратом

$$F(\psi) = \int_{-\infty}^{\infty} \left| \alpha x \psi(x) + \frac{d\psi}{dx} \right|^2 dx.$$

Перепишем функционал в виде:

$$\begin{aligned} F(\psi) &= \alpha^2 \int_{-\infty}^{\infty} x^2 |\psi(x)|^2 dx + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\psi}{dx}^* \frac{d\psi}{dx} dx + \\ &+ \alpha \int_{-\infty}^{\infty} x \left( \psi^*(x) \frac{d\psi}{dx} + \psi(x) \frac{d\psi^*}{dx} \right) dx = I_1 + I_2 + I_3. \end{aligned}$$

Очевидно, что

$$\begin{aligned} I_1 &= \alpha^2 \langle x^2 \rangle = \alpha^2 D_x, \\ I_2 &= - \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{d^2 \psi}{dx^2} dx = \frac{1}{\hbar^2} \langle p^2 \rangle = D_p / \hbar^2, \\ I_3 &= \alpha \int_{-\infty}^{\infty} x \frac{d}{dx} |\psi(x)|^2 dx = -\alpha \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = -\alpha. \end{aligned}$$

Поэтому условие неотрицательности функционала  $F(\psi)$  приобретает вид:

$$\alpha^2 D_x - \alpha + D_p / \hbar^2 \geq 0.$$

Для того, чтобы полученный квадратичный (по  $\alpha$ ) трехчлен был неотрицательным при любых значениях  $\alpha$ , его дискриминант  $\Delta = 1 - 4D_x D_p / \hbar^2$  должен быть меньше нуля, т. е. должно быть выполнено условие

$$D_x D_p \geq \hbar^2 / 4.$$

Таким образом, для произвольного вида волновой функции произведение дисперсий импульса и координаты не может быть меньше, чем  $\hbar^2 / 4$ . Как мы видели, знак равенства (т. е. минимальная величина произведения  $D_x D_p$ ) достигается для гауссового волнового пакета. То, что гауссов пакет есть единственное состояние с минимальным значением  $D_x D_p$ , видно из следующих рассуждений: функционал  $F(\psi)$  обращается в нуль только если выполнено условие

$$\alpha x \psi(x) + \frac{d\psi}{dx} \equiv 0,$$

отсюда для волновой функции, минимизирующей соотношение неопределенностей, получаем

$$\psi(x) \sim \exp(-\alpha x^2),$$

т. е. гауссоиду.

Вводя понятия неопределенностей координаты и импульса  $\Delta x = \sqrt{D_x}$  и  $\Delta p = \sqrt{D_p}$ , можем записать соотношение неопределенностей в виде

$$\Delta x \Delta p \geq \hbar/2.$$

**3.6(36).** Определить собственные значения и собственные функции операторов импульса  $\hat{p}_x = -i\hbar \partial/\partial x$ , кинетической энергии  $\hat{T}_x = \hat{p}_x^2/2m$ ,  $z$ -проекции момента количества движения  $\hat{L}_z = -i\hbar \partial/\partial \varphi$ .

### Решение

Решая задачу  $\hat{p}\psi_p(x) = p\psi_p(x)$ , получим:

$$\psi_p(x) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} px\right).$$

Нормировать такие собственные функции обычным образом  $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$  затруднительно, так как интеграл от квадрата модуля комплексной экспоненты равен единице и интеграл по всему пространству

неизбежно будет расходиться:  $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_p|^2 dx \rightarrow \infty$ . Полученную функцию

принято нормировать согласно условию  $\int \psi_p(x)\psi_{p'}^*(x)dx = \delta(p-p')$  (нормировка на  $\delta$ -функцию), что дает

$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} px\right).$$

Спектр (т. е. набор) собственных значений оператора импульса при этом непрерывный: собственное значение  $p$  оператора импульса может принимать любые действительные значения.

Для оператора кинетической энергии, решая задачу  $\hat{T}\psi_E(x) = E\psi_E(x)$ , имеем:

$$\psi_E(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\pm \frac{i}{\hbar} \sqrt{2mE} x\right).$$

Спектр данного оператора также непрерывный, а каждое собственное значение оператора кинетической энергии оказывается двукратно

вырожденным, т. е. каждому значению  $E$  соответствуют две волновые функции, описывающие движение частицы в положительном и отрицательном направлении оси  $Ox$  с импульсом  $p_E = \sqrt{2mE}$ , что хорошо видно из сравнения системы собственных функций операторов кинетической энергии и импульса частицы. Вопрос существования общей системы собственных функций у двух операторов физических величин будет более подробно обсуждаться в последующей задаче. Отметим также, что набор собственных функций оператора кинетической энергии можно записать и иначе:

$$\tilde{\psi}_E(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \begin{cases} \cos\left(\frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}x\right), \\ \sin\left(\frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}x\right). \end{cases}$$

Как видно, функции  $\tilde{\psi}_E(x)$  могут быть представлены в виде линейной суперпозиции функций  $\psi_E(x)$ , верно и обратное утверждение.

Для оператора  $\hat{L}_z$  находим собственные функции точно так же, как и для оператора импульса:

$$\psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(im\varphi).$$

Но в этом случае имеется существенное отличие: спектр оператора оказывается строго дискретным  $L_z = m\hbar$ , где  $m$  принимает лишь целые значения  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

Дискретность спектра собственных значений  $L_z$  возникает из дополнительного естественного условия периодичности волновой функции  $\psi_m(\varphi + 2\pi) = \psi_m(\varphi)$ . Собственные функции нормированы согласно условию:

$$\int_0^{2\pi} |\psi_m(\varphi)|^2 d\varphi = 1.$$

**3.7(37).** Может ли быть так, что в одном и том же состоянии импульс и полная энергия имеют точно определенные значения?

### Решение

Зная решение предыдущей задачи, мы сразу же можем дать положительный ответ. Зададимся чуть более общим вопросом: в каком случае импульс и полная энергия системы могут одновременно иметь



точно определенные значения? Для того, чтобы в одном и том же состоянии импульс и полная энергия имели строго определенные значения (т. е. данное состояние было собственным вектором как оператора импульса, так и оператора полной энергии) должно выполняться условие:

$$[\hat{H}, \hat{p}] = 0, \text{ где } \hat{H} \text{ – гамильтониан системы.}$$

Проведем вычисления для одной из компонент оператора импульса, например для  $\hat{p}_x$ . Учитывая, что  $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ , а  $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x, y, z)$ , видим, что оператор импульса, очевидно, коммутирует с оператором кинетической энергии (следствие этого мы и получали в предыдущей задаче). Поэтому

$$[\hat{H}, \hat{p}_x]\psi = (\hat{H}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{H})\psi = -i\hbar \left( V \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} (V\psi) \right).$$

Получаем:

$$[\hat{H}, \hat{p}_x] = i\hbar \frac{\partial V}{\partial x},$$

т. е. для того, чтобы коммутатор был равен нулю необходимо, чтобы внешнее поле было пространственно однородным ( $\nabla V = 0$ ).

**3.8(38).** Состояние частицы определяется волновой функцией

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{\pi}}} \cdot \exp(ik_0x) \cdot \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2a^2}\right).$$

Определить плотность вероятности распределения импульса  $W(p)$ .

### Решение

Заданное состояние представимо в виде суперпозиции состояний с точно определенными значениями импульса  $\psi_p(x) = \frac{\exp(ipx/\hbar)}{\sqrt{2\pi\hbar}}$ :

$$\psi(x) = \int C_p \psi_p(x) dp.$$

Таким образом, переход к волновой функции, которая задает амплитуду вероятности распределения импульса, осуществляется путем обычного преобразования Фурье. При этом величина  $W(p) = |C_p|^2$  является искомой плотностью вероятности и может быть определена как

$$C_p = \int \psi(x) \psi_p^*(x) dx.$$

Остается лишь вычислить этот интеграл.

$$C_p = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{\pi}}} e^{ik_0x} \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2a^2}\right) \exp\left(-i\frac{px}{\hbar}\right) dx.$$

Обозначая  $\beta = k_0 - \frac{p}{\hbar}$ , выделим в степени экспоненты полный квадрат:

$$-\frac{1}{2} \left( \frac{(x-2x_0+x_0^2) - 2i\beta x a^2}{a^2} \right) = -\frac{1}{2} \left( \frac{x - (x_0 + i\beta a^2)}{a} \right)^2 - \frac{x_0^2}{2a^2} + \frac{(x_0 + i\beta a^2)^2}{2a^2}.$$

После этого оставшийся интеграл легко считается – это интеграл Пуассона, и мы получаем:

$$\begin{aligned} C_p &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar a\sqrt{\pi}}} \exp\left(-\frac{x_0^2}{2a^2} + \frac{(x_0 + i\beta a^2)^2}{2a^2}\right) \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(x - (x_0 + i\beta a^2))^2}{a^2}\right) dx = \\ &= \frac{\sqrt{a}}{\sqrt{\hbar\sqrt{\pi}}} \exp\left(-\frac{x_0^2}{2a^2} + \frac{(x_0 + i\beta a^2)^2}{2a^2}\right) = \frac{\sqrt{a}}{\sqrt{\hbar\sqrt{\pi}}} \exp\left(\frac{2ix_0\beta a^2 - \beta^2 a^4}{2a^2}\right) = \\ &= \frac{\sqrt{a}}{\sqrt{\hbar\sqrt{\pi}}} \exp(2ix_0\beta - \beta^2 a^2) = \frac{\sqrt{a}}{\sqrt{\hbar\sqrt{\pi}}} \exp\left(2ix_0\left(k_0 - \frac{p}{\hbar}\right) - \left(k_0 - \frac{p}{\hbar}\right)^2 a^2\right). \end{aligned}$$

Возводя в квадрат модуль этого выражения, получим:

$$W(p)dp = |C_p|^2 dp = \frac{a}{\hbar\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{(p - \hbar k_0)^2 a^2}{\hbar^2}\right) dp.$$

Отметим, что распределение по импульсам тоже получилось гауссовым, что является известным свойством преобразования Фурье.

**3.9(39).** Волновая функция некоторой системы в сферических координатах определяется выражением

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(\theta, \varphi) \cdot \sin \varphi / \sqrt{\pi}.$$

Какие значения  $z$ -проекции момента количества движения и с какой вероятностью могут быть измерены в этом состоянии? Каковы среднее значение и дисперсия величины  $L_z$ ?

### Решение

Разложим  $\sin \varphi$  по собственным функциям оператора  $\hat{L}_z$ . В данном случае это делается элементарно с помощью применения формулы Эйлера:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r, \theta) \frac{e^{i\varphi} - e^{-i\varphi}}{2i\sqrt{\pi}} = R(r, \theta) \frac{1}{i\sqrt{2}} (\Phi_{m=+1} - \Phi_{m=-1}),$$

где  $\hat{L}_z \Phi_m = m\hbar \Phi_m$ . В разложение входят только две собственные функции оператора  $\hat{L}_z$ , а значит, при измерении могут быть получены только значения  $L_z = \pm\hbar$ . Причем вероятности измерения того или иного значения определяются квадратами модулей коэффициентов разложения. В данном случае из общих соображений понятно, что вероятности должны быть равны между собой ( $\Phi_{m=+1}$  и  $\Phi_{m=-1}$  входят в разложение равноправно). В итоге  $W_{\pm\hbar} = 1/2$ .

Среднее значение величины  $L_z$  равно:

$$\langle L_z \rangle = W_{+\hbar} \cdot \hbar + W_{-\hbar} \cdot (-\hbar) = 0.$$

В этом можно также убедиться, вычислив соответствующий интеграл (здесь  $dV$  означает интегрирование по радиальной координате и углу  $\theta$ ):

$$\langle L_z \rangle = -i\hbar \int_0^{2\pi} \psi^* \frac{\partial}{\partial \varphi} \psi dV d\varphi \sim \int_0^{2\pi} \sin \varphi \cos \varphi d\varphi = 0.$$

Дисперсия величины  $L_z$ :

$$D_{L_z} = \langle L_z^2 \rangle - \langle L_z \rangle^2 = W_{+\hbar} \cdot \hbar^2 + W_{-\hbar} \cdot (-\hbar)^2 = \hbar^2.$$

Аналогичные вычисления среднего значения величины  $L_z$  с помощью интеграла дают тот же ответ:

$$D_{L_z} = -\hbar^2 \int_0^{2\pi} \psi^* \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \psi dV d\varphi = -\frac{\hbar^2}{\pi} \int_0^{2\pi} \sin \varphi (-\sin \varphi) d\varphi = \hbar^2.$$

**3.10(40).** Волновая функция некоторой системы в сферических координатах определяется выражением

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cdot \sin \theta \cdot \cos \varphi.$$

Какие значения квадрата момента количества движения и с какой вероятностью могут быть измерены в этом состоянии? Каковы среднее значение и дисперсия величины  $L^2$ ?

### Решение

Заданное состояние представим в виде:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \left( \frac{1}{\sqrt{2}} Y_{1,1}(\theta, \varphi) + \frac{1}{\sqrt{2}} Y_{1,-1}(\theta, \varphi) \right),$$

т. е. оно является суперпозицией состояний с одним и тем же орбитальным квантовым числом  $\ell = 1$ , но различными значениями его  $z$ -проекции  $m = \pm 1$ . Следовательно, квадрат момента количества движения в этом состоянии точно определен и равен  $L^2 = \hbar^2 \ell(\ell + 1) = 2\hbar^2$ .

Получить этот результат можно и иначе. Подействуем на заданную волновую функцию оператором квадрата момента количества движения

$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \Delta_{\theta\varphi}$ , где  $\Delta_{\theta\varphi} = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$  – угловая часть оператора Лапласа в сферических координатах:

$$\begin{aligned} \hat{L}^2 \psi &= -\hbar^2 \left( -\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \cos \varphi - \frac{1}{\sin \theta} \cos \varphi \right) R(r) \sqrt{\frac{3}{4\pi}} = \\ &= -\hbar^2 \left( -\frac{1}{\sin \theta} \cos 2\theta - \frac{1}{\sin \theta} \right) \cos \varphi R(r) \sqrt{\frac{3}{4\pi}}. \end{aligned}$$

Полученное выражение легко преобразуется к виду

$$\hat{L}^2 \psi(r, \theta, \varphi) = 2\hbar^2 \psi(r, \theta, \varphi),$$

т. е. данная волновая функция оказалась собственной функцией оператора  $\hat{L}^2$ . Это означает, что при измерении может быть получено только одно значение  $L^2$ , равное собственному значению  $2\hbar^2$ , причем с единичной вероятностью. Среднее значение для данного состояния совпадает с единственным возможным при измерении. Кроме того, легко видеть, что дисперсия величины  $L^2$  в таком состоянии равна нулю, так как среднее значение квадрата оператора и квадрат среднего значения всегда совпадают в состояниях, являющихся собственными функциями этого оператора.

Вообще говоря, использовать второй способ решения задачи можно только в случае, если заданное состояние является собственным состоянием рассматриваемого оператора. В общем случае, подействовав оператором на заданную функцию, мы можем лишь проверить, является ли она собственной функцией оператора или нет.

**3.11(41).** Частица массы  $m$  находится в одномерной бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме шириной  $a$ . Написать

волновые функции хотя бы двух состояний, в которых среднее значение энергии частицы равно  $\langle E \rangle = \frac{2\pi^2\hbar^2}{ma^2}$ .

**Решение**

Для начала найдем энергии и волновые функции стационарных состояний данной системы:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x \in [-a/2, a/2], \\ \infty, & x \notin [-a/2, a/2]. \end{cases}$$

Для этого решаем стационарное уравнение Шредингера с естественными граничными условиями:

$$\begin{cases} \psi(x \geq a/2) = 0, \\ \psi(x \leq -a/2) = 0 \end{cases}$$

– частица точно находится внутри потенциальной ямы.

В области  $x \in [-a/2, a/2]$  уравнение Шредингера имеет вид:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0. \tag{1}$$

Вводя  $k^2 = 2mE/\hbar^2$  ( $k > 0$ ), запишем общее решение (1) в виде

$$\psi(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx).$$

Граничные условия дают  $B = 0$  и  $k_n a = n\pi$ , где  $n$  – целое число. Для уровней энергии получаем:

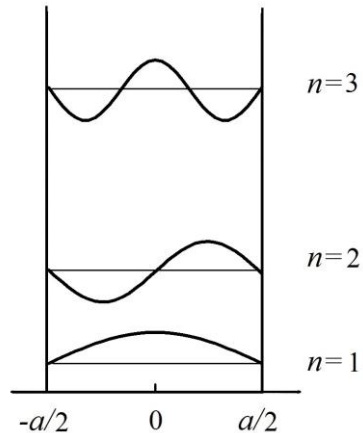
$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Нормированные волновые функции имеют вид (см. рисунок):

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{2/a} \cos(n\pi x/a), & n = 1, 3, 5, \dots \\ \sqrt{2/a} \sin(n\pi x/a), & n = 2, 4, 6, \dots \end{cases}$$

При этом волновой функции  $\psi_2$  соответствует значение энергии

$$E_2 = \frac{2\pi^2\hbar^2}{ma^2}, \text{ так что одно искомое}$$



состояние, в котором средняя энергия равна  $\langle E \rangle = \frac{2\pi^2 \hbar^2}{ma^2}$ , мы уже нашли.

Рассмотрим теперь состояние, характеризующееся волновой функцией вида:

$$\psi = \sqrt{\frac{2}{a}} (A \cos(\pi x/a) + B \cos(3\pi x/a)),$$

являющейся суперпозицией первого и третьего стационарных состояний данной системы. Средняя энергия в таком состоянии определяется вероятностями обнаружения системы в одном из двух собственных состояний  $\psi_n$ :

$$\langle E \rangle = |A|^2 E_1 + |B|^2 E_3.$$

Добавляя к этому равенству условие нормировки

$$|A|^2 + |B|^2 = 1,$$

получаем систему уравнений для определения величин  $|A|^2$ ,  $|B|^2$ . Решение полученной системы есть  $|A|^2 = 5/8$ ,  $|B|^2 = 3/8$ . Отметим, что при этом относительная фаза между амплитудами вероятности  $A$  и  $B$  может быть выбрана любой.

Например, заданной средней энергией обладает состояние с волновой функцией:

$$\psi = \sqrt{\frac{5}{8}} \psi_1(x) + \sqrt{\frac{3}{8}} \psi_3(x).$$

Разумеется, можно простроить бесконечное множество и других состояний с заданным значением средней энергии.

**3.12(42).** Частица массы  $m$  находится в основном состоянии в одномерной бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме шириной  $a$ . Найти значения  $p_x$ , которые могут быть измерены в этом состоянии. Каковы вероятность их измерения и среднее значение величины  $p_x$ ?

### Решение

Для решения этой задачи достаточно разложить волновую функцию стационарного состояния в бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме  $\psi_1(x)$  по собственным функциям оператора импульса

$$\psi_p(x) = \frac{\exp(ipx/\hbar)}{\sqrt{2\pi\hbar}}:$$

$$\psi(x) = \int C_p \psi_p(x) dp.$$

Величина  $dP = W(p)dp = |C_p|^2 dp$  определяет вероятность обнаружения при измерении импульса в интервале  $(p, p + dp)$ . Поскольку

$$C_p = \int \psi(x) \psi_p^*(x) dx,$$

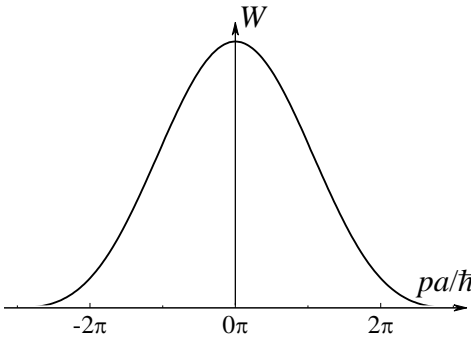
то

$$W(p) = \left| \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1(x) \psi_p^*(x) dx \right|^2 = \left| \int_{-a/2}^{a/2} \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{\pi x}{a} \cdot \frac{\exp(-ipx/\hbar)}{\sqrt{2\pi\hbar}} dx \right|^2.$$

Вычисляя интеграл, находим

$$W(p) = \frac{1}{4\pi\hbar a} \left| \int_{-a/2}^{a/2} [(\exp(i(\pi/a - p/\hbar)x)) + (\exp(-i(\pi/a + p/\hbar)x))] dx \right|^2 =$$

$$= \frac{4\pi a}{\hbar} \cdot \left[ \frac{\cos(pa/2\hbar)}{\pi^2 - (pa/\hbar)^2} \right]^2.$$



Полученное распределение приведено на рисунке.

Функция  $W(p)$  является четной, это позволяет легко вычислить среднее значение импульса в стационарном состоянии:

$$\langle p_x \rangle = \int p W(p) dp = 0.$$

**3.13(43).** Показать, что для частицы, движущейся в потенциальном поле  $V(x, t)$ , справедливо утверждение (теорема Эренфеста)

$$\frac{d\langle p_x \rangle}{dt} = - \left\langle \frac{\partial V(x, t)}{\partial x} \right\rangle.$$

Здесь скобки означают усреднение по квантовому состоянию.

### Решение

Воспользуемся общими методами вычисления средних значений и запишем выражение для  $\langle p_x \rangle$ :

$$\langle p_x(t) \rangle = \int \psi^*(x, t) \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(x, t) dx.$$

Тогда, производя в следующем выражении дифференцирование под знаком интеграла и используя уравнение Шредингера, имеем:

$$\frac{d\langle p_x(t) \rangle}{dt} = \int \left( (\hat{H}\psi)^* \frac{\partial}{\partial x} \psi - \psi^* \frac{\partial}{\partial x} (\hat{H}\psi) \right) dx.$$

Используя условие самосопряженности гамильтониана, получим:

$$\frac{d\langle p_x(t) \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar} \int \psi^*(x, t) [\hat{H}, \hat{p}_x] \psi(x, t) dx.$$

Раньше мы уже показали (см. задачу 3.7), что  $[\hat{H}, \hat{p}_x] = i\hbar \frac{\partial V}{\partial x}$ , поэтому из последнего равенства немедленно получаем то, которое требовалось доказать:

$$\frac{d\langle p_x \rangle}{dt} = - \left\langle \frac{\partial V(x, t)}{\partial x} \right\rangle.$$

**3.14(44).** Показать, что для частицы, движущейся в потенциальном поле  $V(x)$ , среднее по квантовому состоянию значение импульса удовлетворяет соотношению  $\langle p_x \rangle = m \frac{d\langle x \rangle}{dt}$ . Здесь  $\langle x \rangle$  – среднее значение координаты,  $m$  – масса частицы.

### Решение

Поступим аналогично тому, как мы действовали в предыдущей задаче:

$$\left\langle \frac{dx}{dt} \right\rangle = \frac{i}{\hbar} \int [(\hat{H}\psi)^* x \psi - \psi^* x (\hat{H}\psi)] dx = \frac{i}{\hbar} \int \psi^* [\hat{H}, x] \psi dx,$$

т. е. среднее значение производной по времени от координаты равно среднему значению коммутатора гамильтониана системы с координатой. Этот коммутатор хорошо известен и легко вычисляется прямыми методами. Он равен  $-i\hbar \frac{\hat{p}_x}{m}$ .

В итоге для средних значений получаем искомое соотношение:

$$\langle p_x \rangle = m \frac{d\langle x \rangle}{dt}.$$



**3.15(45).** Показать, что для частицы, движущейся в гармоническом потенциале  $V = m\omega^2 x^2/2$ , изменение во времени среднего значения координаты  $\langle x(t) \rangle$  определяется классическим законом движения.

**Решение**

Исходя из результатов, полученных в задачах 3.13 и 3.14, запишем:

$$\left\langle \frac{dp_x}{dt} \right\rangle = - \left\langle \frac{\partial V(x,t)}{\partial x} \right\rangle \text{ и } \langle p_x \rangle = m \frac{d\langle x \rangle}{dt}.$$

Тогда 
$$\left\langle \frac{dp_x}{dt} \right\rangle = m \frac{d^2\langle x \rangle}{dt^2} = - \left\langle \frac{\partial V(x,t)}{\partial x} \right\rangle = - \langle m\omega^2 x \rangle = -m\omega^2 \langle x \rangle.$$

Т. е. для частицы, движущейся в гармоническом потенциале, величина  $\langle x \rangle$  удовлетворяет классическому уравнению движения

$$m \frac{d^2\langle x \rangle}{dt^2} + m\omega^2 \langle x \rangle = 0,$$

что и позволяет сделать вывод о классическом законе движения  $\langle x(t) \rangle$ .

**3.16(46).** Волновая функция частицы, находящейся в гармоническом потенциале, в момент времени  $t = 0$  определяется выражением

$$\phi(x) = \sqrt{2/3} \cdot \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{\pi}}} \cdot (1 + x/a) \cdot \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2}\right),$$

где  $a^2 = \hbar/m\omega$ . Определить среднее значение координаты частицы как функцию времени.

**Решение**

Сравнивая данную волновую функцию с функциями, описывающими два низших стационарных состояния гармонического осциллятора:

$$\Psi_0 = \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{\pi}}} \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2}\right), \quad \Psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2a\sqrt{\pi}}} \frac{2x}{a} \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2}\right),$$

закключаем, что 
$$\phi(x) = \sqrt{\frac{2}{3}}\Psi_0 + \sqrt{\frac{1}{3}}\Psi_1.$$

Следовательно, эволюция состояний во времени определяется выражением:

$$\phi(x, t) = \sqrt{\frac{2}{3}}\psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}E_0 t} + \sqrt{\frac{1}{3}}\psi_1 e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t} = \left( \sqrt{\frac{2}{3}}\psi_0 + \sqrt{\frac{1}{3}}\psi_1 e^{-i\omega t} \right) e^{-i\frac{\omega}{2}t}.$$

Квантовомеханическое среднее определяется обычным образом:

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \int \phi^*(x, t) \cdot x \phi(x, t) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \left( \frac{2}{3} |\psi_0|^2 x + \frac{1}{3} |\psi_1|^2 x \right) dx + \\ &+ \frac{\sqrt{2}}{3} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_0 x \psi_1 (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) dx. \end{aligned}$$

Первый интеграл равен нулю в силу нечетности подынтегральной функции, он представляет собой сумму средних значений координаты в двух низших стационарных состояниях.

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \frac{2\sqrt{2}}{3} \cos(\omega t) \int_{-\infty}^{+\infty} x \frac{1}{a\sqrt{2\pi}} \frac{2x}{a} \exp\left(-\frac{x^2}{a^2}\right) dx = \\ &= \frac{4}{3} a \cos(\omega t) \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \xi^2 \exp(-\xi^2) d\xi. \end{aligned}$$

Оставшийся интеграл мы уже неоднократно вычисляли, он равен  $\sqrt{\pi}/2$ .

В итоге получаем  $\langle x(t) \rangle = \frac{2}{3} a \cos(\omega t)$ .

Отметим, что задачу также легко было решить, основываясь на теореме Эренфеста. Действительно, для гармонического осциллятора изменение во времени квантовомеханического среднего  $\langle x(t) \rangle$  определяется классическим законом движения, поэтому для решения задачи достаточно найти средние значения координаты и импульса в начальный момент времени:  $\langle p(t=0) \rangle = 0$ ,  $\langle x(t=0) \rangle = 2a/3$ , а затем проинтегрировать уравнения Ньютона.

**3.17(47).** Частица находится в бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме в состоянии  $\psi(x, t=0) = \alpha\varphi_1(x) + \beta\varphi_2(x)$ ;  $\varphi_1(x)$  и  $\varphi_2(x)$  – волновые функции нижних стационарных состояний,  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ . Определить среднее значение и дисперсию координаты частицы как функцию времени.

**Решение**

В задаче 3.11 мы уже нашли спектр и собственные функции гамильтониана частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме. Это позволяет нам при помощи общих рецептов записать зависящую от времени волновую функцию в явном виде:

$$\psi(x, t) = \left[ \alpha \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \beta \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \right] \exp\left(-i \frac{3\pi^2 \hbar}{2ma^2} t\right) \exp\left(-i \frac{\pi^2 \hbar}{2ma^2} t\right).$$

Вводя  $\omega_{21} = \frac{3\pi^2 \hbar}{2ma^2}$  – частота перехода между состояниями, имеем:

$$\begin{aligned} \langle x(t) \rangle &= \int \psi^*(x, t) \cdot x \psi(x, t) dx = \int_{-a/2}^{a/2} (|\alpha \psi_1|^2 x + |\beta \psi_2|^2 x) dx + \\ &+ \int_{-a/2}^{a/2} \psi_1(x, t) x \psi_2(x, t) dx \cdot (\alpha \beta^* \exp(i\omega_{21}t) + \alpha^* \beta \exp(-i\omega_{21}t)). \end{aligned}$$

Симметрия задачи сильно упрощает вычисления. Первые два интеграла ввиду нечетности подынтегральных функций тождественно равны нулю. Вычислим последний:

$$\int_{-a/2}^{a/2} \frac{2}{a} x \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx = \int_{-a/2}^{a/2} \frac{1}{a} x \left( \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right) \right) dx.$$

При этом все сводится к вычислению единственного интеграла:

$$\begin{aligned} \int_{-a/2}^{a/2} \frac{1}{a} x \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx &= \frac{1}{n\pi} \left( -x \cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \Big|_{-a/2}^{a/2} + \int_{-a/2}^{a/2} \cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx \right) = \\ &= \frac{1}{n\pi} \left( -x \cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \Big|_{-a/2}^{a/2} + \frac{a}{n\pi} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \Big|_{-a/2}^{a/2} \right). \end{aligned}$$

Для нечетных значений  $n$  первое слагаемое зануляется и остается только второе. В итоге имеем:

$$\int_{-a/2}^{a/2} \frac{2}{a} x \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx = \frac{a}{\pi^2} \left( 2 - \frac{2}{3^2} \right) = \frac{16a}{9\pi^2}.$$

Тогда

$$\langle x(t) \rangle = \frac{32a}{9\pi^2} \operatorname{Re}[\alpha \beta^* \exp(i\omega_{21}t)].$$

В частности, в самом простом случае, когда параметры  $\alpha$  и  $\beta$  являются действительными, эволюция системы описывается выражением:

$$\langle x(t) \rangle = \frac{32a}{9\pi^2} \alpha\beta \cos(\omega_{21}t).$$

Как видно, центр тяжести пакета совершает гармонические колебания с частотой, равной частоте перехода между состояниями. Максимальное значение амплитуды  $x_{\max} = 16a/9\pi^2 \approx 0.18a$  достигается при  $\alpha = \beta = 1/\sqrt{2}$ .

Теперь перейдем к вычислению дисперсии координаты. Для этого понадобится вычислить среднее значение квадрата координаты частицы:

$$\begin{aligned} \langle x^2(t) \rangle &= \int \Psi^*(x,t) \cdot x^2 \Psi(x,t) dx = \int_{-a/2}^{a/2} (|\alpha\Psi_1|^2 x^2 + |\beta\Psi_2|^2 x^2) dx + \\ &+ \int_{-a/2}^{a/2} \Psi_1 x^2 \Psi_2^* (\alpha\beta^* \exp(i\omega_{21}t) + \alpha^* \beta \exp(-i\omega_{21}t)) dx. \end{aligned}$$

На этот раз последний интеграл равен нулю и остается вычислить только первые два.

$$\begin{aligned} \langle x^2(t) \rangle &= |\alpha|^2 \frac{2}{a} \int_{-a/2}^{a/2} x^2 \cos^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx + |\beta|^2 \frac{2}{a} \int_{-a/2}^{a/2} x^2 \sin^2\left(\frac{2\pi x}{a}\right) dx = \\ &= \frac{1}{a} \int_{-a/2}^{a/2} x^2 dx + \frac{|\alpha|^2}{a} \int_{-a/2}^{a/2} x^2 \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right) dx - \frac{|\beta|^2}{a} \int_{-a/2}^{a/2} x^2 \cos\left(\frac{4\pi x}{a}\right) dx. \end{aligned}$$

При этом:

$$\frac{1}{a} \int_{-a/2}^{a/2} x^2 \cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx = \frac{1}{n\pi} \left( x^2 \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \Big|_{-a/2}^{a/2} - 2 \int_{-a/2}^{a/2} x \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx \right).$$

В последнем интеграле нас теперь интересуют только чётные значения  $n$ , а значит подстановка с синусом равна нулю, и интеграл сводится к тому, который мы уже вычисляли.

$$\begin{aligned} \langle x^2(t) \rangle &= \frac{1}{a} \int_{-a/2}^{a/2} x^2 dx + \frac{|\alpha|^2}{a} \int_{-a/2}^{a/2} x^2 \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right) dx - \frac{|\beta|^2}{a} \int_{-a/2}^{a/2} x^2 \cos\left(\frac{4\pi x}{a}\right) dx = \\ &= \frac{a^2}{12} + |\alpha|^2 \left( -\frac{2}{2\pi} \int_{-a/2}^{a/2} x \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) dx \right) - |\beta|^2 \left( -\frac{2}{4\pi} \int_{-a/2}^{a/2} x \sin\left(\frac{4\pi x}{a}\right) dx \right) = \\ &= \frac{a^2}{12} + |\alpha|^2 \left( -\frac{2}{(2\pi)^2} a^2 \right) - |\beta|^2 \left( +\frac{2}{(4\pi)^2} a^2 \right) = \frac{a^2}{12} - \frac{a^2}{2\pi^2} (|\alpha|^2 + |\beta|^2/4). \end{aligned}$$

Для дисперсии координаты теперь имеем:

$$D_x = \langle x^2(t) \rangle - \langle x(t) \rangle^2 = \frac{a^2}{12} - \frac{a^2}{2\pi^2} (|\alpha|^2 + |\beta|^2 / 4) - \left( \frac{32a}{9\pi^2} \operatorname{Re}[\alpha\beta^* \exp(i\omega_{21}t)] \right)^2.$$

В случае  $\alpha = \beta = 1/\sqrt{2}$  амплитуда изменения дисперсии во времени достигает максимального значения: величина  $D_x$  изменяется в пределах  $D_x \in [0.013a^2; 0.077a^2]$ .

Отметим, что эта задача имела бы гораздо более трудоёмкое с технической точки зрения решение, если изначально выбрать начало координат не в середине ямы. Тогда все собственные функции не характеризовались бы определенной чётностью, и часть интегралов не были бы заведомо равны нулю. В целом ряде задач умелое использования свойств симметрии может значительно упростить решение.

**3.18(48).** Определить энергию нижнего стационарного состояния частицы в одномерной прямоугольной потенциальной яме конечной глубины в случаях: а)  $B = 2mV_0a^2/\hbar^2 \ll 1$ , б)  $B = 2mV_0a^2/\hbar^2 \gg 1$  ( $V_0$  – глубина потенциальной ямы,  $a$  – ее ширина).

### Решение

Рассмотрим симметричную прямоугольную потенциальную яму конечной глубины. Пусть потенциал задан в следующем виде (см. рис.1):

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x \in [-a/2, a/2]. \\ V_0, & x \notin [-a/2, a/2]. \end{cases}$$

Введем обозначения  $k^2 = 2mE/\hbar^2$  и  $\kappa^2 = 2m(V_0 - E)/\hbar^2$ . Попробуем найти энергии и волновые функции стационарных состояний. Так как мы имеем дело со связанным состоянием, то обе введенные величины являются положительными. Тогда в каждой из областей непрерывности потенциала уравнение Шредингера, к решению которого сводится задача по отысканию уровней энергии, имеет вид

$$\text{области I, III} \quad \psi'' - \kappa^2\psi = 0,$$

$$\text{область II} \quad \psi'' + k^2\psi = 0.$$

Рассмотрим поочередно случай чётных и нечётных состояний. Как мы отмечали, использование свойств симметрии системы значительно упрощает вычисления.

а) чётные состояния  $\psi(x) = \psi(-x)$ .

Решения имеют вид:

область I  $\psi_I = A_I \exp(kx)$ ,

область II  $\psi_{II} = A_{II} \cos(kx)$ ,

область III  $\psi_{III} = A_{III} \exp(-kx)$ .

При этом  $A_I = A_{III}$ . «Сшивая» функции и первые производные в точке разрыва потенциала  $x = a/2$ , найдем

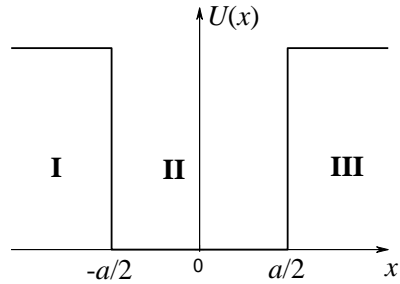


Рис. 1.

$$A_{II} \cos(ka/2) = A_{III} \exp(-ka/2),$$

$$-kA_{II} \sin(ka/2) = -kA_{III} \exp(-ka/2).$$

Отсюда, разделив второе равенство на первое, получим:

$$ka \cdot \operatorname{tg}(ka/2) = \sqrt{\frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} - (ka)^2}. \quad (1)$$

Будем анализировать решение уравнения (1) графически. Корни уравнения могут быть определены как абсциссы точек пересечения функции  $f_1(\xi) = \xi \operatorname{tg}(\xi/2)$  и дуги окружности  $f_2(\xi) = \sqrt{B - \xi^2}$  (здесь  $\xi = ka$ ) радиуса  $\sqrt{B} = \sqrt{2mV_0 a^2 / \hbar^2}$  (см. рис. 2). Как видно из графиков, хотя бы один корень уравнения, т. е. одно чётное связанное состояние всегда существует.

б) нечётные состояния  $\psi(x) = -\psi(-x)$ .

Решения имеют вид:

область I  $\psi_I = A_I \exp(kx)$ ,

область II  $\psi_{II} = A_{II} \sin(kx)$ ,

область III  $\psi_{III} = A_{III} \exp(-kx)$ ,

причем  $A_I = -A_{II}$ . Так же, как и в предыдущем случае, из условия непрерывности функции и ее первой производной получаем уравнение для определения значений энергии нечётных состояний:

$$-ka \cdot \text{ctg}(ka/2) = \sqrt{\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2} - (ka)^2} . \quad (2)$$

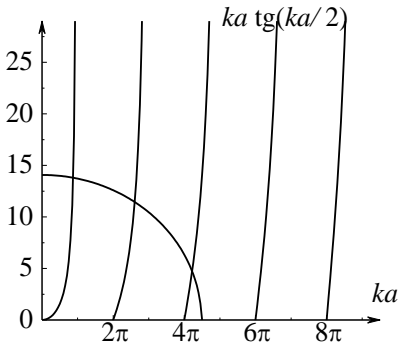


Рис. 2.

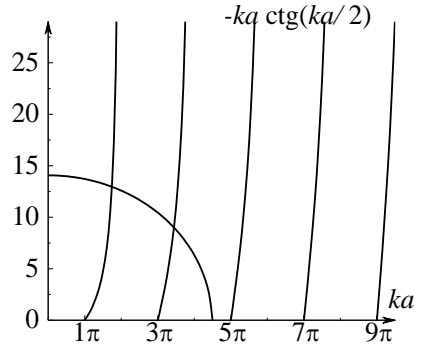


Рис. 3.

Структуру энергетического спектра, получающегося из решения уравнения (2), иллюстрирует рис. 3. Из графика видно, что условием возникновения первого нечётного состояния является неравенство

$$B = \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2} \geq \pi^2 .$$

Это означает, что основным состоянием всегда является чётное состояние и именно оно нас и интересует в данной задаче. Случай а) соответствует «мелкой» яме. Очевидно, что энергия любого связанного состояния не превышает глубину потенциальной ямы. А значит условие  $2mV_0a^2/\hbar^2 \ll 1$  обеспечивает выполнение неравенства  $ka \ll 1$ . В этом случае уравнение (1) можно записать в виде:

$$(ka)^2/2 \approx \sqrt{2mV_0a^2/\hbar^2 - (ka)^2} .$$

Откуда, решая квадратное уравнение, находим значение энергии состояния:

$$(ka)^2 = -2 + 2\sqrt{1 + \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}} \text{ и}$$

$$E_1 = \frac{(\hbar k)^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{2}{a^2} \left( \sqrt{1 + \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}} - 1 \right) \approx V_0 \left( 1 - \frac{1}{4} \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2} \right).$$

Это означает, что в случае «мелкой» ямы единственный связанный уровень энергии всегда находится вблизи границы континуума, т. е. состояние является слабосвязанным: энергия связи  $E_b = |E_1 - V_0| \approx BV_0/4 \ll V_0$ .

Случай б) соответствует «глубокой» яме, т. е. ситуации, когда в яме расположено много уровней. Тогда, как видно из рис. 2, приближенное решение уравнения (1) для положения основного состояния следует искать в виде  $ka = \pi - \delta$ , ( $\delta \ll 1$ ). Аналогично, раскладывая в получившемся уравнении  $\operatorname{tg}\left(\frac{\pi}{2} - \frac{\delta}{2}\right)$  в ряд и решая получающееся уравнение, имеем:

$$\delta \approx 2\pi / \sqrt{\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}}.$$

А это означает, что энергия основного состояния составляет:

$$E_1 = \frac{(\hbar k)^2}{2m} \approx \frac{\hbar^2}{2ma^2} \left( \pi - 2\pi / \sqrt{\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}} \right)^2 \approx \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \left( 1 - 4 / \sqrt{\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}} \right),$$

т. е. в глубокой яме основное состояние лежит практически там же, где должно находиться основное состояние бесконечно глубокой потенциальной ямы того же размера.

Таким образом, имеем:

в «мелкой» яме ( $B = 2mV_0a^2/\hbar^2 \ll 1$ ):  $E_1 \approx V_0(1 - B/4)$ ,

в «глубокой» яме ( $B = 2mV_0a^2/\hbar^2 \gg 1$ ):  $E_1 \approx \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (1 - 4/\sqrt{B})$ .

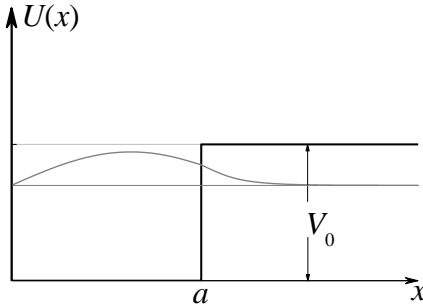
**3.19(49).** Частица массы  $m$  находится в одномерном потенциале

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < 0, \\ 0, & 0 \leq x \leq a, \\ V_0, & x > a. \end{cases}$$

Определить, сколько связанных состояний находится в яме в следующих случаях: а)  $V_0a^2 = 75\hbar^2/m$ , б)  $V_0a^2 = \hbar^2/m$ .



**Решение**



Для решения этой задачи заметим, прежде всего, что поскольку граничное условие в точке  $x=0$  имеет вид  $\psi(x=0)=0$ , данная задача эквивалентна задаче нахождения нечётных состояний в симметричной одномерной яме глубиной  $V_0$  и шириной  $2a$ . Качественно вид волновой функции основного состояния

приведен на рисунке.

Выполняя действия аналогичные тем, которые описаны в предыдущей задаче, получим уравнение для определения энергетического спектра системы

$$k a \operatorname{ctg}(ka) = -ka = -\sqrt{2mV_0 a^2 / \hbar^2 - (ka)^2},$$

где введены обозначения  $k^2 = 2mE / \hbar^2$  и  $\kappa^2 = 2m(V_0 - E) / \hbar^2$ .

С аналогичным уравнением мы уже встречались в предыдущей задаче. Оно допускает простую геометрическую интерпретацию: его решения являются пересечениями графика функции  $-\xi \operatorname{ctg}(\xi)$  и окружности радиуса  $\sqrt{2mV_0 a^2 / \hbar^2}$ . Число точек пересечения и будет определять число корней данного уравнения. При этом первый корень появляется при достижении радиусом окружности значения  $\pi/2$ , т. е. при  $\sqrt{2mV_0 a^2 / \hbar^2} = \pi/2$ , а каждый последующий – при увеличении значения радиуса на  $\pi$ . Для числа корней можно выписать общее выражение: число корней будет равно  $N$ , если радиус окружности удовлетворяет условию

$$\pi/2 + (N - 1)\pi < \sqrt{2mV_0 a^2 / \hbar^2} < \pi/2 + N\pi.$$

Тогда в случае а)  $\sqrt{2mV_0a^2/\hbar^2} = \sqrt{2} < \pi/2$ , т. е. в яме уровней нет, а в случае б)  $\sqrt{2mV_0a^2/\hbar^2} = \sqrt{150} \approx 12.25$ . Поскольку  $12.25 > 3.5\pi$ , но  $< 4.5\pi$ , то заключаем, что в яме четыре уровня.

**3.20(50).** Показать, что волновая функция системы из двух взаимодействующих частиц может быть представлена в виде произведения волновых функций, описывающих относительное движение частиц и движение центра масс.

### Решение

Будем считать, что взаимодействие между частицами определяется лишь относительной координатой  $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$ , где  $\vec{r}_1$  и  $\vec{r}_2$  – координаты первой и второй частиц, т. е.  $V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$ . Гамильтониан двух взаимодействующих частиц с массами  $m_1$  и  $m_2$  в координатном

представлении имеет вид:  $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\Delta_2 + V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$ , где

производные берутся по координатам первой и второй частиц соответственно. Перейдем от описания системы при помощи радиус-векторов отдельных частиц к векторам относительного движения и положения центра масс:

$$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \quad \text{и} \quad \vec{R} = \frac{m_1\vec{r}_1 + m_2\vec{r}_2}{m_1 + m_2}.$$

Выражая производные по старым координатам через производные по новым (например,  $\frac{\partial}{\partial \vec{r}_1} = \frac{\partial}{\partial \vec{R}} \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{r}_1} + \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \frac{\partial \vec{r}}{\partial \vec{r}_1}$ ), придем к гамильтониану системы в новых переменных. Если энергия взаимодействия между частицами зависит только от относительного расстояния между ними, то гамильтониан будет иметь вид:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2(m_1 + m_2)}\Delta_R - \frac{\hbar^2}{2\frac{m_1m_2}{m_1 + m_2}}\Delta_r + V(\vec{r}).$$

Для такого гамильтониана в стационарном уравнении Шредингера оказывается возможным провести разделение переменных, что также приводит к факторизации волновой функции системы. Это означает, что в квантовом случае общее движение складывается из движения всей системы как целого и относительного движения вокруг центра масс. При

этом последнее представление гамильтониана имеет четко выраженный физический смысл: первое слагаемое описывает свободное движение всей системы как целого с суммарной массой  $M = m_1 + m_2$ , а второе слагаемое – движение квазичастицы приведенной массы  $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$  относительно центра масс.

**3.21(51).** Дейтрон имеет энергию связи  $E_b = 2.23$  МэВ, среднее расстояние между протоном и нейтроном  $a = 2 \cdot 10^{-13}$  см, возбужденного состояния у дейтрона нет. Используя эти данные, оценить глубину потенциальной ямы поля ядерных сил. **Указание:** Яму считать прямоугольной, а ее размер положить равным расстоянию  $a$ .

### Решение

Воспользовавшись решением предыдущей задачи, запишем уравнение Шредингера, описывающее относительное движение нуклонов в дейтроне:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \psi(\vec{r}) + V(r)\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}),$$

где  $r$  – расстояние между нуклонами,  $\mu \approx M_p/2$  – приведенная масса,  $M_p$  – масса протона.

Будем считать, что волновая функция дейтрона сферически симметрична, т. е. волновая функция зависит лишь от модуля радиус-вектора  $\vec{r}$ . Тогда уравнение для волновой функции дейтрона  $\psi(r) = u(r)/r$  запишем в виде:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 u}{dr^2} + V(r)u = Eu.$$

В качестве граничного условия в точке  $r=0$  следует положить  $u(r=0)=0$ . Данная задача математически эквивалентна задаче 3.19 о нахождении уровней в одномерной яме шириной  $R$ , одна из стенок которой является бесконечно высокой, а другая имеет высоту  $V_0$ . Аналогично задаче 3.18 получаем уравнение, связывающее положение энергетических уровней с параметрами потенциала в следующем виде:

$$-kR \cdot \text{ctg}(kR) = \sqrt{\frac{2\mu V_0 R^2}{\hbar^2} - (kR)^2}. \quad (1)$$

Учитывая, что энергия состояния  $E = V_0 - E_b = \hbar^2 k^2 / 2\mu$ , уравнение (1) перепишем в виде:

$$\sqrt{E_b} = -\sqrt{V_0 - E_b} \operatorname{ctg} \sqrt{\frac{2\mu(V_0 - E_b)R^2}{\hbar^2}},$$

или

$$\zeta/A = -\operatorname{tg}(\zeta),$$

где  $\zeta = A\sqrt{(V_0/E_b - 1)}$ ,  $A = \sqrt{2\mu E_b R^2 / \hbar^2} \approx 0.465$ .

Состояние в яме является единственным. Поэтому, предполагая, что яма является «мелкой», будем искать решение уравнения в виде  $\zeta = \pi/2 + \delta$ ,  $\delta \ll 1$ . Тогда имеем  $\pi/2A \approx \operatorname{ctg}(\delta) \approx 1/\delta$ . В результате  $\zeta = \pi/2 + 2A/\pi^2 \approx 1.866$ , откуда находим  $V_0 = E_b(1 + \zeta^2/A^2) \approx 38.1$  МэВ, т.е. дейтрон действительно является слабосвязанной системой  $E_b \ll V_0$ . Полученное значение хорошо совпадает с оценкой глубины ямы в 35 МэВ, обычно используемой в ядерной физике.

Отметим, что аппроксимация поля ядерных сил центральносимметричным потенциалом (например, в виде прямоугольной потенциальной ямы) является лишь грубым приближением реального взаимодействия между нуклонами. Прежде всего заметим, что поле ядерных сил не является центральным и зависит от ориентации спинов взаимодействующих нуклонов. Так, действительно хорошо известно, что полный спин дейтрона равен единице (система является триплетной), т.е. спины протона и нейтрона «параллельны», в то время в синглетном случае (полный спин равен нулю) связанного состояния в системе протон–нейтрон не существует. Следовательно, потенциальная яма в этом случае является более «мелкой».

**3.22(52).** Определить энергетический спектр и волновые функции стационарных состояний трехмерного изотропного гармонического осциллятора  $V = m\omega^2 r^2/2$ .

### Решение

Запишем стационарное уравнение Шредингера для данной задачи:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + \frac{m\omega^2 r^2}{2} \psi = E\psi.$$

Гамильтониан данной задачи за счет специфической зависимости потенциальной энергии от радиальной координаты допускает разбиение на независимые слагаемые в декартовых координатах. Это, в свою

очередь, позволяет разделить переменные в уравнении Шредингера и искать решение в виде:

$$\Psi(x, y, z) = \Psi_x(x)\Psi_y(y)\Psi_z(z).$$

Тогда решение уравнения Шредингера сводится к решению трех независимых уравнений, описывающих динамику одномерного гармонического осциллятора. А для одномерного гармонического осциллятора известны и волновые функции, и энергии стационарных состояний.

$$E = E_x + E_y + E_z = \hbar\omega(n_x + n_y + n_z + 3/2) = \hbar\omega(n + 3/2),$$

$$\Psi(x, y, z) = N_{n_x} N_{n_y} N_{n_z} H_{n_x}(x/a) H_{n_y}(y/a) H_{n_z}(z/a) \exp(-\frac{1}{2}((r/a)^2)),$$

где  $n = n_x + n_y + n_z$ ,  $n_x, n_y, n_z$  – целые неотрицательные числа,  $a = \sqrt{\hbar/m\omega}$ ,

$H_n(\zeta)$  – полином Эрмита,  $N_n = (2^n n! a \sqrt{\pi})^{-1/2}$  – нормировочная константа.

**3.23(53).** Определить энергетический спектр и волновые функции стационарных состояний системы связанных линейных гармонических осцилляторов с гамильтонианом  $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \alpha x_1 x_2$ , где  $\hat{H}_i = \hat{T}_i + m\omega_0^2 x_i^2 / 2$  – гамильтониан гармонического осциллятора с частотой  $\omega_0$ ,  $\alpha$  – константа связи.

### Решение

Переходя в систему отсчета, связанную с центром масс, введем

$$X = (x_1 + x_2)/2, \quad x = x_1 - x_2.$$

Тогда гамильтониан системы имеет вид:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial X^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{M\omega_0^2 X^2}{2} + \frac{\mu\omega_0^2 x^2}{2} + \alpha(X^2 - x^2/4),$$

где  $\mu = m/2$ ,  $M = 2m$  – приведенная и полная массы системы соответственно. В новой системе координат имеем два независимых осциллятора, с частотами

$$\Omega_{1,2} = \begin{cases} \omega_0 \sqrt{1 + \alpha/m\omega_0^2}, \\ \omega_0 \sqrt{1 - \alpha/\mu\omega_0^2}, \end{cases}$$

причем частота  $\Omega_1$  соответствует частоте колебательного движения центра масс, а  $\Omega_2$  – частоте колебаний относительного движения частиц.

Уровни энергии и волновые функции стационарных состояний есть

$$\begin{aligned}
 E_{N,n} &= \hbar\Omega_1(N+1/2) + \hbar\Omega_2(n+1/2) = \\
 &= \hbar\omega\sqrt{1+\alpha/m\omega^2}(N+1/2) + \hbar\omega\sqrt{1-\alpha/m\omega^2}(n+1/2), \\
 \Psi_{N,n}(X,x) &= N_N N_n H_N(X/A) H_n(x/a) \exp\left(-\frac{X^2}{2A^2} - \frac{x^2}{2a^2}\right).
 \end{aligned}$$

Здесь  $A = \sqrt{\hbar/M\Omega_1}$ ,  $a = \sqrt{\hbar/\mu\Omega_2}$ ,  $n, N = 0, 1, 2, \dots$

Константа связи  $\alpha$  должна быть достаточно малой, так чтобы удовлетворять условию  $\alpha/m\omega^2 < 1$ . В частности, для основного состояния при  $\alpha/m\omega^2 \ll 1$  получим:

$$\begin{aligned}
 E_{0,0} &= (\hbar\Omega_1 + \hbar\Omega_2) / 2 = \\
 &= \hbar\omega(1 + \sqrt{1+\alpha/m\omega^2} + \sqrt{1-\alpha/m\omega^2}) / 2 \approx \hbar\omega\left(1 - \frac{1}{8}(\alpha/m\omega^2)^2\right), \\
 \Psi_{0,0}(X,x) &= \frac{1}{\sqrt{\pi a A}} \exp\left(-\frac{X^2}{2A^2} - \frac{x^2}{2a^2}\right) \approx \\
 &\approx \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}\left((x_1^2 + x_2^2) + x_1 x_2 \frac{\alpha}{m\omega^2}\right)\right) \approx \\
 &\approx \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}(x_1^2 + x_2^2)\right) \left(1 - \frac{x_1 x_2}{\hbar/m\omega} \cdot \frac{\alpha}{2m\omega^2}\right).
 \end{aligned}$$

Важно заметить, что функция двух взаимодействующих частиц не может быть факторизована на произведение двух одночастичных функций, т. е. функций, зависящих от координат только первой и только второй частицы.

**3.24(54).** Определить уровни энергии одномерного ангармонического осциллятора  $U = m\omega^2 x^2/2 + \alpha x^4$ . Ангармоническую добавку считать малой.

### Решение

Опишем коротко процедуру решения задачи по теории возмущений. Пусть потенциальная энергия имеет вид  $U = U_0 + V$ , где  $V$  – «малое возмущение». Что имеется в виду под малостью, мы поймем чуть позже. Пусть, кроме того, известно решение задачи с невозмущенным гамильтонианом  $\hat{H}_0$ . Будем искать решение новой задачи в виде рядов:

$$E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + \dots,$$

$$\Psi_n = \Psi_n^{(0)} + \Psi_n^{(1)} + \dots = \Psi_n^{(0)} + \sum_k C_{nk}^{(1)} \Psi_k^{(0)} + \dots$$

Поправка к волновым функциям стационарных состояний разложена по собственным функциям невозмущенной системы.

Запишем стационарное уравнение Шредингера:

$$(H_0 + V)(\Psi_n^{(0)} + \sum_k C_{nk}^{(1)} \Psi_k^{(0)} + \dots) = (E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + \dots)(\Psi_n^{(0)} + \sum_k C_{nk}^{(1)} \Psi_k^{(0)} + \dots).$$

Ограничиваясь первым порядком, оставляем в левой и правой частях равенства только слагаемые первого порядка малости. При этом учтем свойства стационарных состояний. Получим:

$$V\Psi_n^{(0)} + \sum_k C_{nk}^{(1)} E_k^{(0)} \Psi_k^{(0)} = E_n^{(1)} \Psi_n^{(0)} + E_n^{(0)} \sum_k C_{nk}^{(1)} \Psi_k^{(0)}.$$

Домножая последнее равенство на  $(\Psi_m^{(0)})^*$  и интегрируя по всем переменным, получим при  $m = n$  выражение для поправки к энергии  $n$ -го уровня:

$$E_n^{(1)} = \int (\Psi_n^{(0)})^* V \Psi_n^{(0)} d\tau \equiv V_{nn},$$

а при  $m \neq n$  поправки к волновой функции стационарного состояния:

$$C_{nm}^{(1)} = \frac{V_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}.$$

Теперь мы понимаем, что «малость» возмущения означает малость матричного элемента оператора возмущения по сравнению с расстоянием между уровнями энергии невозмущенного гамильтониана. Если это условие не выполняется хотя бы для какой-то пары уровней, то теорией возмущений в данной задаче воспользоваться не удастся – придется решать задачу более точно.

Перейдем к вычислению поправок к уровням энергии в первом порядке теории возмущений.

$$E_n^{(1)} = V_{nn} = \alpha \left( 2^n n! a \sqrt{\pi} \right)^{-1} \int_{-\infty}^{+\infty} H_n(x/a) x^4 H_n(x/a) \exp\left(-\frac{x^2}{a^2}\right) dx =$$

$$= \alpha a^4 \left( 2^n n! \sqrt{\pi} \right)^{-1} \int_{-\infty}^{+\infty} H_n(\xi) \xi^4 H_n(\xi) \exp(-\xi^2) d\xi.$$

Воспользуемся свойством полиномов Эрмита:

$$\xi H_m(\xi) = m H_{m-1}(\xi) + \frac{1}{2} H_{m+1}(\xi).$$

Дважды применяя это свойство, получим:

$$\xi^2 H_n(\xi) = \frac{1}{4} (H_{n+2}(\xi) + (4n+2)H_n(\xi) + 4n(n-1)H_{n-2}(\xi)).$$

Тогда искомым интеграл примет вид:

$$E_n^{(1)} = \frac{\alpha a^4}{16(2^n n! \sqrt{\pi})} \int_{-\infty}^{+\infty} (H_{n+2}(\xi) + (4n+2)H_n(\xi) + 4n(n-1)H_{n-2}(\xi))^2 \exp(-\xi^2) d\xi.$$

Под знаком интеграла остались только полиномы Эрмита, а значит, ввиду свойства их ортогональности, оставшийся интеграл берется легко. При этом при раскрытии квадрата суммы все перекрестные слагаемые дадут нулевой вклад. Учитывая необходимость соблюдения правильной нормировки, получим:

$$E_n^{(1)} = \frac{\alpha a^4}{4} ((n+1)(n+2) + (2n+1)^2 + n(n-1)) = \frac{3\alpha a^4}{4} (2n^2 + 2n + 1).$$

Отметим, что полученное выражение справедливо при выполнении условия  $E_n^{(1)} \ll \hbar\omega$ .

**3.25(55).** Определить энергии стационарных состояний заряженной частицы, находящейся в гармоническом потенциале  $V_0 = m\omega^2 x^2/2$ , в присутствии внешнего однородного постоянного электрического поля с напряженностью  $E_0$ .

### Решение

Точное решение задачи легко найти, если заметить, что после включения электрического поля потенциал будет определяться как

$$V(x) = m\omega^2 x^2/2 - eE_0 x = \frac{1}{2} m\omega^2 \left( x - eE_0/m\omega^2 \right)^2 - \frac{e^2 E_0^2}{2m\omega^2}$$

и соответствовать осцилляторному потенциалу с той же частотой, но со смещенными точкой равновесия и уровнем отсчета энергии. Поэтому

$$E_n = \hbar\omega(n+1/2) - \frac{e^2 E_0^2}{2m\omega^2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Если решать задачу приближенно, рассматривая воздействие внешнего электрического поля как возмущение, т. е.  $\hat{V} = -eE_0 x$ , то поскольку  $V_{nn} = eE_0 x_{nn} = 0$ , проводим расчет во втором порядке теории возмущений:



$$\begin{aligned} \Delta E_n &= \sum_{k \neq n} \frac{|V_{kn}|^2}{E_n - E_k} = \frac{|V_{n-1n}|^2}{\hbar\omega} - \frac{|V_{n+1n}|^2}{\hbar\omega} = \frac{e^2 E_0^2}{\hbar\omega} (x_{nn-1}^2 - x_{nn+1}^2) = \\ &= \frac{e^2 E_0^2}{\hbar\omega} \frac{\hbar}{2m\omega} (n - (n+1)) = -\frac{e^2 E_0^2}{2m\omega^2}. \end{aligned}$$

Второй порядок теории возмущений дал ответ, совпадающий с точным решением задачи.

**3.26(56).** Используя теорию возмущений, найти энергию и волновую функцию основного состояния системы из двух связанных линейных осцилляторов, описываемую гамильтонианом  $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \alpha x_1 x_2$ . Результат сравнить с точным решением (см. задачу 3.23).

### Решение

Поправки к энергии основного состояния и волновым функциям будем искать по рецепту, изложенному в задаче 3.24. При этом волновые функции стационарных состояний невозмущенного гамильтониана:  $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2$  имеют вид, аналогичный найденным в задаче 3.22:

$$\Psi_{n,k}^{(0)}(x_1, x_2) = N_n N_k H_n(x_1/a) H_k(x_2/a) \exp\left(-\frac{x_1^2 + x_2^2}{2a^2}\right).$$

Здесь  $N_n = (2^n n! a \sqrt{\pi})^{-1/2}$  – нормировочный коэффициент,  $a = \sqrt{\hbar/m\omega}$ .

Для поправки к энергии основного состояния в первом порядке теории возмущений имеем:

$$\Delta E^{(1)} = V_{00,00} \propto \iint_{-\infty}^{\infty} dx_1 dx_2 H_0^2(x_1/a) H_0^2(x_2/a) x_1 x_2 \exp\left(-\frac{x_1^2 + x_2^2}{a^2}\right) = 0.$$

Последний интеграл равен нулю в силу нечетности подынтегральной функции, т. е. энергия основного состояния в первом порядке теории возмущений составляет  $\hbar\omega$ , что совпадает с первым порядком разложения точного решения в ряд по параметру  $\alpha$  (т. е. в первом порядке эффекты смещения нормальных частот относительно невозмущенной компенсируют друг друга).

Во втором порядке теории возмущений находим

$$\Delta E^{(2)} = \sum_{m,p=1}^{\infty} \frac{|V_{00,mp}|^2}{E_{00} - E_{mp}} = -\frac{|V_{00,11}|^2}{2\hbar\omega}.$$

Вычисляя матричный элемент

$$V_{00,11} = \alpha \cdot \langle \Psi_{1,1}^{(0)}(x_1, x_2) | x_1 x_2 | \Psi_{0,0}^{(0)}(x_1, x_2) \rangle = \alpha a^2 / 2,$$

получим

$$\Delta E^{(2)} = -\frac{\alpha^2 a^4}{8\hbar\omega} = -\frac{\hbar\omega}{8} \left( \alpha / m\omega^2 \right)^2,$$

что совпадает с разложением решения задачи 3.23 во втором порядке по параметру  $\alpha/m\omega^2$ .

Для поправки к волновой функции имеем:

$$\begin{aligned} \delta\Psi^{(1)}(x_1, x_2) &= \sum_{m,p=1} C_{00,mp} \Psi_{n,k}^{(0)} = \\ &= -\frac{V_{00,11}}{2\hbar\omega} \Psi_{1,1}^{(0)}(x_1, x_2) = -\frac{\alpha a^2}{4\hbar\omega} \Psi_{1,1}^{(0)}(x_1, x_2) = -\frac{\alpha}{4m\omega^2} \Psi_{1,1}^{(0)}(x_1, x_2). \end{aligned}$$

Полученное выражение также может быть получено из точного решения задачи 3.23 как результат разложения по малому параметру  $\alpha/m\omega^2$ . Действительно, расписывая в явном виде выражение для функции  $\Psi_{1,1}^{(0)}(x_1, x_2)$ , найдем

$$\delta\Psi^{(1)}(x_1, x_2) = -\frac{\alpha}{4m\omega^2} \cdot \sqrt{\frac{m\omega}{4\pi\hbar}} \cdot \frac{4x_1 x_2}{\hbar/m\omega} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}(x_1^2 + x_2^2)\right),$$

что совпадает с поправкой к волновой функции основного состояния системы, полученной в задаче 3.23.

**3.27(57).** В атоме трития ядро  ${}^3_1\text{H}$  испытывает  $\beta$ -распад с образованием ядра  ${}^3_2\text{He}$ . Определить вероятность того, что образующийся водородоподобный ион гелия будет находиться в основном состоянии. **Указание:** Поскольку образующийся при  $\beta$ -распаде электрон является быстрым, изменение заряда ядра можно считать мгновенным.

### Решение

Будем считать, что электрон в атоме трития находится до распада в основном состоянии  $1s$ . Тогда радиальная часть его волновой функции с учетом нормировки:

$$\Psi_{1s, {}^3\text{H}} = \frac{2}{a_0^{3/2}} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right).$$

Считая  $\beta$ -распад мгновенным, заключаем, что состояние атомного электрона в процессе распада ядра не изменилось, то есть вероятность того, что образующийся ион гелия окажется в основном состоянии, находится из разложения начальной волновой функции по базису стационарных состояний нового гамильтониана (гамильтониана водородоподобного иона гелия  $Z = 2$ ):

$$\hat{H} = \hat{T} - \frac{Ze^2}{r}.$$

Поскольку волновая функция основного состояния водородоподобного иона гелия есть

$$\Psi_{1s,2He} = Z \frac{2}{a_0^{3/2}} \exp\left(-\frac{Zr}{a_0}\right),$$

искомая вероятность равна:

$$\begin{aligned} P &= \left| \left\langle \Psi_{1s,1H} \left| \Psi_{1s,2He} \right. \right\rangle \right|^2 = \int_0^{+\infty} \frac{2}{(a_0)^{3/2}} e^{-\frac{r}{a_0}} 2 \left( \frac{2}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right) r^2 dr = \\ &= \frac{4 \cdot 2^{3/2}}{(a_0)^3} \int_0^{+\infty} \exp\left(-\frac{3r}{a_0}\right) r^2 dr = \frac{4 \cdot 2^{3/2}}{(3)^3} \Gamma(3) = \frac{8 \cdot 2^{3/2}}{(3)^3} \approx 0,70. \end{aligned}$$

## Глава 4. «Барьерные» задачи

1. Волновая функция удовлетворяет уравнению непрерывности:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\vec{j}) = 0,$$

где  $\rho(\vec{r}, t) = |\psi(\vec{r}, t)|^2$  – плотность вероятности,  $\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*)$  – плотность тока вероятности.

2. Прозрачность потенциального барьера с профилем  $V(x)$  в квазиклассическом приближении ( $T \ll 1$ ):

$$T \approx \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int \sqrt{2m(V(x) - E)} dx\right),$$

где  $E$  – полная энергия частицы, а интеграл берется по области классически запрещенного движения.

### Задачи

**4.1(58).** Определить величину плотности тока вероятности для состояния  $\psi(x) = A \exp(ikx) + B \exp(-ikx)$ .

### Решение

Плотность тока вероятности определяется выражением:

$$j_x = \frac{\hbar}{2mi} \left( \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right).$$

Подставляя данную волновую функцию в выражение, имеем:

$$\begin{aligned} j_x &= \frac{\hbar}{2mi} (A \exp(ikx) + B \exp(-ikx))^* \cdot (Aik \exp(ikx) - Bik \exp(-ikx)) - \\ &- \frac{\hbar}{2mi} (A \exp(ikx) + B \exp(-ikx)) \cdot (Aik \exp(ikx) - Bik \exp(-ikx))^* . \end{aligned}$$

Проводя алгебраические преобразования, получим:

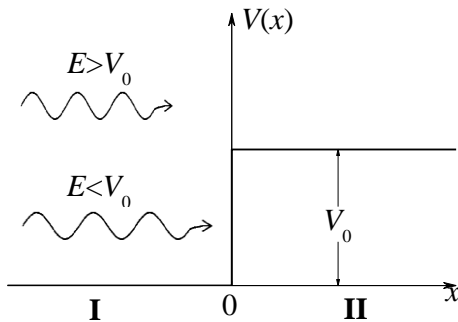
$$j_x = \frac{\hbar k}{m} (|A|^2 - |B|^2).$$

С физической точки зрения полученный результат можно трактовать следующим образом: заданное состояние есть суперпозиция потоков частиц, имеющих скорость  $v = \hbar k/m$ , движущихся в положительном и отрицательном направлении вдоль оси  $X$ , причем плотности числа частиц в потоках (в одномерном случае число частиц на единицу длины)

соответственно равны  $|A|^2$  и  $|B|^2$ . При этом в итоговом ответе для тока вероятности отсутствует интерференция волн, распространяющихся в противоположные стороны, хотя, как легко видеть, такая интерференция наблюдается в распределении плотности вероятности  $\rho(x) = |\psi(x)|^2$ .

**4.2(59).** Поток частиц с энергией  $E$  рассеивается на прямоугольной потенциальной ступеньке  $V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ V_0, & x \geq 0 \end{cases}$  (см. рисунок). Определить вероятности прохождения и отражения. Нарисовать графики зависимости  $|\psi(x)|^2$  для случаев «подбарьерного»  $E < V_0$  и «надбарьерного»  $E > V_0$  движения.

### Решение



Рассмотрим сначала случай  $E > V_0$  («надбарьерный» случай). Введем обозначения

$$k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar \quad \text{и}$$

$$k_2 = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar.$$

Запишем стационарное одномерное уравнение Шредингера:

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

Частные решения уравнения Шредингера в областях  $\begin{cases} \text{I} & x < 0 \\ \text{II} & x > 0 \end{cases}$

хорошо известны:  $\psi_{\text{I}}^{(1,2)} = \exp(\pm ik_1 x)$  и  $\psi_{\text{II}}^{(1,2)} = \exp(\pm ik_2 x)$ . Суперпозиция этих решений должна представлять собой решение любой задачи. Будем считать, что поток частиц налетает на ступеньку слева. Тогда, по смыслу, слева от барьера присутствуют падающий и отраженный потоки частиц, а справа от барьера только прошедший поток. Поэтому решение задачи должно иметь вид:

$$\psi_{\text{I}} = \exp(ik_1 x) + A \exp(-ik_1 x) \quad \text{и} \quad \psi_{\text{II}} = B \exp(ik_2 x).$$

Первое слагаемое функции  $\psi_{\text{I}}$  задает падающую волну. При этом коэффициент при первой экспоненте определяет плотность числа частиц

в падающем потоке и может быть выбран произвольно. Мы положим этот коэффициент равным единице. Вероятности отражения  $R$  и прохождения  $T$  частиц через ступеньку определим как  $R = j_R/j_0$  и  $T = j_T/j_0$ , где  $j_R, j_T, j_0$  – отраженный, прошедший и падающий потоки соответственно. Поскольку  $j_R = \frac{\hbar k_1}{m} |A|^2$ ,  $j_T = \frac{\hbar k_2}{m} |B|^2$ ,  $j_0 = \frac{\hbar k_1}{m} \cdot 1$ , для вероятностей отражения и прохождения получим:

$$R = j_R/j_0 = |A|^2, \quad T = j_T/j_0 = \frac{k_2}{k_1} |B|^2.$$

Для определения коэффициентов  $A$  и  $B$  завершим решение задачи на стационарное уравнение Шредингера. Из условия непрерывности волновой функции и ее первой производной<sup>1</sup> в точке разрыва потенциала ( $x = 0$ ) получим следующую систему уравнений:

$$\begin{cases} 1 + A = B, \\ k_1 - k_1 A = k_2 B. \end{cases}$$

Эта система уравнений легко решается:

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

В результате получаем вероятности отражения и прохождения для частицы, рассеивающейся на потенциальной ступеньке.

$$R = |A|^2 = \left( \frac{1 - \sqrt{1 - V_0/E}}{1 + \sqrt{1 - V_0/E}} \right)^2, \quad T = \frac{k_2}{k_1} |B|^2 = \frac{4\sqrt{1 - V_0/E}}{\left(1 + \sqrt{1 - V_0/E}\right)^2}.$$

Существенно отметить, что в отличие от классической механики, частица с некоторой вероятностью отражается от ступеньки даже в случае  $E > V_0$  (так называемый эффект надбарьерного отражения). Только если  $E \gg V_0$ , находим, что  $T \rightarrow 1$ , т. е. сверхэнергетичные частицы почти не испытывают отражения.

Перейдем к рассмотрению «подбарьерного» случая  $E < V_0$ . В этом случае вводим  $k = \sqrt{2mE}/\hbar$  и  $\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$ . Тогда с учетом физической постановки задачи решения в областях  $I$  и  $II$  запишутся в виде:

$$\psi_I = \exp(ikx) + A \exp(-ikx) \quad \text{и} \quad \psi_{II} = B \exp(-\kappa x).$$

«Сшивая» функцию и ее первую производную в точке  $x = 0$ , получим

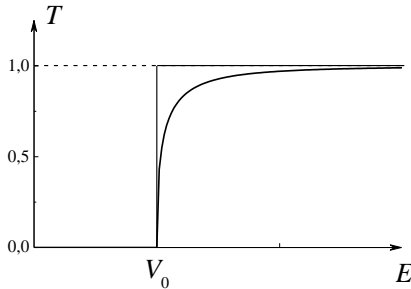
<sup>1</sup> С физической точки зрения эти условия предполагают непрерывность вектора плотности тока вероятности, т. е. сохранение числа частиц.

$$\begin{cases} 1 + A = B, \\ ik(1 - A) = -\kappa B, \end{cases}$$

откуда находим

$$A = \frac{1 - i\kappa/k}{1 + i\kappa/k}, \quad B = \frac{2}{1 + i\kappa/k},$$

откуда следует  $|A|^2 = 1$ , т. е. в подбарьерной области отражение происходит с вероятностью  $R = 1$ , а значит  $T = 0$ . Физически этот результат понятен: частица не может пройти через бесконечно широкий барьер, потому что у нее недостаточно для этого энергии. Она определенно испытает отражение. Данный результат можно получить и проще. Из вида волновой функции в области II сразу следует, что поток вероятности  $j_T \equiv 0$ , а следовательно  $T = 0$ .



Общий график зависимости  $T(E)$  приведен на рисунке. Ступенькой на графике приведена та же зависимость, которая получается из чисто классических представлений. В зависимости от того, энергия частиц больше или меньше высоты потенциальной ступеньки, они либо проходят,

либо отражаются от нее.

В заключение приведем графики распределения плотностей вероятности  $|\psi(x)|^2$  для обоих случаев. В «подбарьерном» случае имеем

$$\rho_I(x) = |\exp(ikx) + A \exp(-ikx)|^2 = 2(1 + \operatorname{Re}(A \exp(2ikx))).$$

Учитывая, что

$$\operatorname{Re}(A \exp(2ikx)) = \frac{1 - (\kappa/k)^2}{1 + (\kappa/k)^2} \cos(2kx) - \frac{2\kappa/k}{1 + (\kappa/k)^2} \sin(2kx),$$

выражение для  $\rho_I(x)$  можно переписать в виде

$$\rho_I(x) = 2 \left( 1 + \frac{1 - (\kappa/k)^2}{1 + (\kappa/k)^2} \cos(2kx) \right) - \frac{4(\kappa/k)}{1 + (\kappa/k)^2} \sin(2kx)$$

или  $\rho_I(x) = 2(1 + \cos(2kx + \varphi))$ , где  $\varphi = \arctg\left(\frac{2\kappa/k}{1 - (\kappa/k)^2}\right)$ .

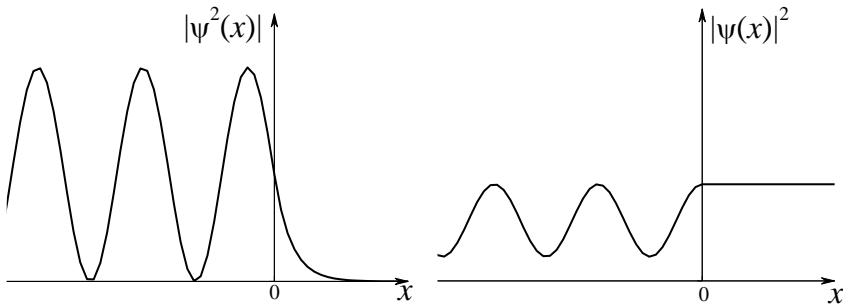
В области положительных значений координаты имеем:

$$\rho_{II}(x) = \frac{4}{1 + (\kappa/k)^2} \exp(-2\kappa x).$$

В «надбарьерном» случае  $E > V_0$  распределения плотности вероятности имеют вид:

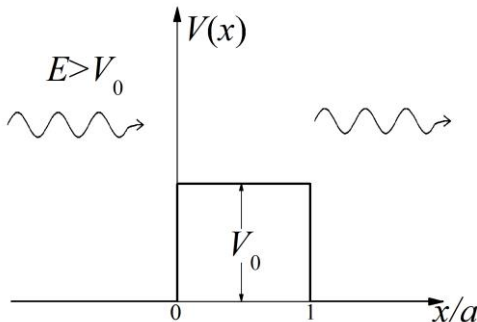
$$\rho_I(x) = 1 + \left( \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2 + 2 \left( \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right) \cos(2k_1 x), \quad \rho_{II}(x) = \frac{4k_1^2}{(k_1 + k_2)^2}.$$

В обоих случаях слева от барьера наблюдается интерференционная картина, обусловленная потоками частиц, распространяющихся в противоположные стороны. При этом в подбарьерном случае, поскольку модули амплитуд волн распространяющихся в противоположные стороны равны, слева от барьера в результате интерференции возникают области, в которых плотность вероятности



обращается в нуль.

**4.3(60).** Поток частиц с энергией  $E$  рассеивается на прямоугольном потенциальном барьере высотой  $V_0$  и шириной  $a$ , причем  $E > V_0$  (надбарьерное прохождение). Определить энергии, при которых вероятность отражения от барьера равна нулю (резонанс прозрачности).



### Решение

Сохраним обозначения введенные в предыдущей задаче:

$$k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar \quad \text{и}$$

$$k_2 = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar.$$

Описанный в задаче барьер



$$I : x < 0,$$

изображен на рисунке. На этот раз мы имеем три области:  $II : x \in [0, a]$ ,

$$III : x > a,$$

в которых нужно решать уравнение Шредингера, а затем «сшивать» полученные волновые функции. Будем искать решение в виде:

$$\psi_I = \exp(ik_1x) + A \exp(-ik_1x),$$

$$\psi_{II} = B_2 \exp(ik_2x) + A_2 \exp(-ik_2x),$$

$$\psi_{III} = B_3 \exp(ik_1x).$$

Записывая условия непрерывности функции и ее производной на границах барьера  $x=0$  и  $x=a$ , имеем:

$$\begin{cases} 1 + A = B_2 + A_2, \\ k_1(1 - A) = k_2(B_2 - A_2), \\ B_3 \exp(ik_1a) = B_2 \exp(ik_2a) + A_2 \exp(-ik_2a), \\ k_1 B_3 \exp(ik_1a) = k_2(B_2 \exp(ik_2a) - A_2 \exp(-ik_2a)). \end{cases}$$

Для решения задачи достаточно решить приведенную систему уравнений, найти амплитуду  $B_3$ , взяв ее абсолютное значение, возвести в квадрат и найти, при каких энергиях полученное значение обращается в единицу. Такой вариант решения был бы неоправданно затратным и громоздким. Попробуем упростить решение задачи. Нас интересует случай, когда отраженная волна отсутствует, т. е. когда  $A=0$ . Положим, что это равенство выполняется. В этом случае в системе из четырех уравнений останется только три неизвестных:

$$\begin{cases} 1 = B_2 + A_2, \\ k_1 = k_2(B_2 - A_2), \\ B_3 \exp(ik_1a) = B_2 \exp(ik_2a) + A_2 \exp(-ik_2a), \\ k_1 B_3 \exp(ik_1a) = k_2(B_2 \exp(ik_2a) - A_2 \exp(-ik_2a)). \end{cases}$$

В итоге, можно заключить, что реализуется одна из двух возможностей: либо данная система не имеет решений (система несовместна), либо система имеет решение, а ее уравнения линейно зависимы. Первый случай соответствует неправильно угаданному значению  $A$  и нас он не интересует. Рассмотрим второй случай, т. е. будем считать, что уравнения системы являются линейно зависимыми. В этом случае одно из уравнений системы (например, последнее) можно выкинуть и решать упрощенную систему.

Из системы линейных уравнений находим  $B_3$ :

$$B_3 = \frac{\exp(-ik_1a)}{k_2 + 1} [(k_1 + 1) \exp(ik_2a) + (k_2 - k_1) \exp(-ik_2a)].$$

Вероятность прохождения через барьер тогда определяется выражением:

$$T = |B_3|^2 = \cos^2(k_2 a) + \frac{(2k_1 + 1 - k_2)^2}{(k_2 + 1)^2} \sin^2(k_2 a).$$

При этом очевидно  $k_1 > k_2$ , а значит полученное нами выражение для коэффициента прохождения  $T \geq 1$ . Понятно, почему так получилось. В интересующих нас случаях резонанса прозрачности коэффициент отражения действительно равен единице, во всех остальных – обнуление коэффициента отражения заведомо неправомерно (это соответствует несовместной исходной системе уравнений), оно приводит к нарушению нормировки и, как следствие, к завышенному значению коэффициента прохождения.

Коэффициент при квадрате синуса в выражении для  $T$  всегда больше единицы, за исключением тривиального случая отсутствия барьера. Это означает, что единственная возможность выполнения равенства  $T = 1$  совпадает с условием линейной зависимости уравнений системы  $\sin(k_2 a) = 0$ . Отсюда имеем условие на энергию налетающих частиц:

$$\frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar} = \pi n \Rightarrow E_n = V_0 + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2.$$

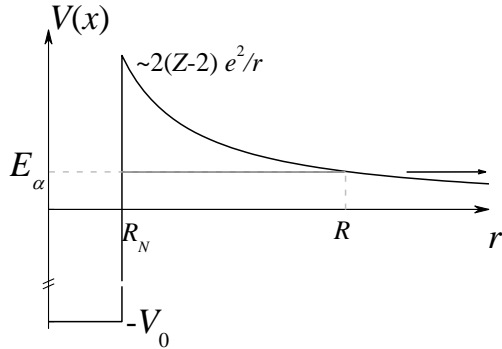
Остается только проверить, что все найденные решения действительно соответствуют случаю линейно зависимой исходной системы уравнений. Для этого отметим, что при выполнении полученного условия  $\exp(ik_2 a) = \cos(k_2 a) + i \sin(k_2 a) = \cos(k_2 a)$ . А значит система действительно является линейно зависимой при всех найденных значениях  $E_n$ , так как отношение первых двух уравнений равно отношению последних двух уравнений. Последнее означает, что все полученные решения действительно соответствуют заявленному случаю  $T = 1$ .

Отметим, что при выполнении указанного равенства на ширине барьера укладывается полуцелое число длин волн де Бройля. Такое же условие определяет и энергии связанных состояний в одномерной бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме.

**4.4(61).** Оценить время жизни  $\alpha$ -радиоактивных ядер  ${}_{86}^{222}\text{Rn}$  и  ${}_{92}^{238}\text{U}$ . Энергии  $E_\alpha$  вылетающих  $\alpha$ -частиц соответственно равны 6.6 МэВ и 4.2 МэВ. Радиус ядра считать равным  $R_N = 1.2 \cdot 10^{-13} A^{1/3}$  (см),  $A$  – массовое число.

## Решение

В соответствии с простейшей теорией  $\alpha$ -распада Г. Гамова, будем считать, что в ядре уже имеется  $\alpha$ -частица, которая движется в поле, создаваемом ядром-остатком с зарядом  $Z-2$ . На больших расстояниях это поле определяется законом Кулона, а на малых расстояниях (порядка



размера ядра  $R_N$ ) оказываются существенными ядерные силы, являющиеся силами притяжения. Будем считать, что потенциальная яма поля ядерных сил является прямоугольной, а ее размер совпадает с размером ядра (см. рисунок), т. е. модельный потенциал, описывающий взаимодействие  $\alpha$ -частицы с ядром-остатком имеет вид:

$$V(r) = \begin{cases} -V_0, & r < R_N, \\ 2 \frac{(Z-2)e^2}{r}, & r \geq R_N. \end{cases}$$

Явления  $\alpha$ -распада обусловлено возможностью туннелирования через потенциальный барьер, как это показано на рисунке. Прозрачность кулоновского барьера определяется соотношением:

$$T = \exp \left( -\frac{2}{\hbar} \sqrt{2M_\alpha} \int_{R_N}^R \sqrt{V(r) - E_\alpha} dr \right),$$

где  $R$  — расстояние, на котором начинается классически разрешенная область для частицы с энергией  $E_\alpha$  и которое определяется соотношением:

$$2 \frac{(Z-2)e^2}{R} = E_\alpha.$$

Вычислим входящий в выражение для вероятности туннелирования интеграл:

$$\int_{R_N}^R \sqrt{U - E_\alpha} dr = \sqrt{E_\alpha} \int_{R_N}^R \sqrt{\frac{R}{r} - 1} dr .$$

Проводя последовательно замены:  $r = Rx^2$  и  $x = \sin \varphi$ , имеем:

$$2\sqrt{E_\alpha} R \int_{\sqrt{R_N/R}}^1 \sqrt{1 - x^2} dx = 2\sqrt{E_\alpha} R \int_{\varphi_0}^{\pi/2} \cos^2 \varphi d\varphi = \sqrt{E_\alpha} R \left( \frac{\pi}{2} - \varphi_0 - \frac{1}{2} \sin(2\varphi_0) \right) .$$

Здесь  $\sin \varphi_0 = \sqrt{\frac{R_N}{R}}$ . Используя соотношение  $\varphi_0 \ll 1$ , можно упростить выражение:

$$\sqrt{E_\alpha} R \left( \frac{\pi}{2} - \varphi_0 - \frac{1}{2} \sin(2\varphi_0) \right) \approx \sqrt{E_\alpha} R \left( \frac{\pi}{2} - 2\varphi_0 \right) \approx \sqrt{E_\alpha} R \left( \frac{\pi}{2} - 2\sqrt{\frac{R_N}{R}} \right) .$$

Подставляя выражение для  $R$ :

$$\int_a^R \sqrt{U - E_\alpha} dr \approx \sqrt{E_\alpha} R \left( \frac{\pi}{2} - 2\sqrt{\frac{a}{R}} \right) = \frac{2(Z-2)e^2}{\sqrt{E_\alpha}} \left( \frac{\pi}{2} - 2\sqrt{\frac{R_N E_\alpha}{2(Z-2)e^2}} \right) .$$

Зная туннельную прозрачность барьера, время жизни ядра можно оценить следующим образом: оно обратно пропорционально частоте «столкновений»  $\alpha$ -частицы со стенками потенциальной ямы и прозрачности барьера  $\tau = 1/(vT)$ . При этом частоту столкновений можно оценить исходя из соотношения неопределенностей:

$$v \sim \frac{v}{R_N} \sim \frac{\hbar}{M_\alpha R_N^2}$$

где  $v \sim \hbar/M_\alpha R_N$  – характерное значение скорости  $\alpha$ -частицы внутри ядра,  $M_\alpha$  – ее масса.

В итоге получим оценку на время жизни  $\alpha$ -радиоактивного ядра:

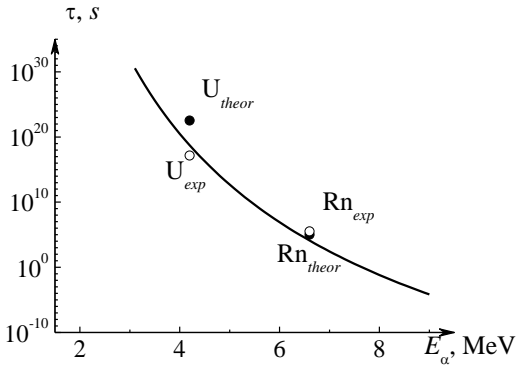
$$\tau \approx \frac{M_\alpha R_N^2}{\hbar} \exp \left[ \frac{2}{\hbar} \sqrt{2M_\alpha} \frac{2(Z-2)e^2}{\sqrt{E_\alpha}} \left( \frac{\pi}{2} - 2\sqrt{\frac{R_N E_\alpha}{2(Z-2)e^2}} \right) \right] .$$

При проведении данной оценки мы не учитывали орбитального момента вылетающей  $\alpha$ -частицы. Между тем, возможен распад с ненулевым орбитальным моментом. Еще более точным было бы использование приведенной массы системы ядро–вылетающая частица.

Полученный результат можно представить в виде (закон Гейгера–Неттола)

$$\lg \tau = A / \sqrt{E_\alpha} - B ,$$

где  $A$  и  $B$  – некоторые выражения, слабо меняющиеся от одного ядра к другому и зависящие, главным образом, от  $Z$ . Характерные значения параметров  $A=148$  и  $B=53.5$ , при этом энергия  $\alpha$ -частиц измеряется в МэВ, а время  $\tau$  – в секундах. График этой зависимости представлен на рисунке. Существенно, что при увеличении  $E_\alpha$  от 4 до 9 МэВ время жизни убывает на 25 порядков.



Численные оценки для ядер  ${}^{222}_{86}\text{Rn}$  и  ${}^{238}_{92}\text{U}$  дают 1.30 суток и  $1,04 \cdot 10^{15}$  лет, при этом крайне важно пользоваться точным выражением для интеграла, так как будучи использованным в качестве множителя в показателе экспоненты небольшая погрешность в его

вычислении способна давать существенный вклад в результат. Экспериментальные значения времени жизни для указанных изотопов это соответственно 3.8235 суток и  $4.498 \cdot 10^9$  лет. Соответствующие экспериментальные и расчетные данные также представлены на рисунке. Хотя, казалось бы, отличие расчетных и экспериментальных значений достаточно велико, рассмотренную нами модель следует считать удовлетворительной.

## Глава 5. Квантовомеханическая модель атома водорода

1. Волновые функции стационарных состояний дискретного спектра в произвольном центрально-симметричном поле притяжения  $V(r)$ :

$$\Psi_{n\ell m}(\vec{r}) = R_{n\ell}(r)Y_{\ell m}(\theta, \varphi),$$

где  $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$  – сферическая функция, причем  $\ell = 0, 1, 2, \dots, n-1$  – орбитальное квантовое число,  $m = -\ell, -(\ell-1), \dots, 0, \dots, \ell-1, \ell$  – магнитное квантовое число,  $n$  – главное квантовое число, а  $R_{n\ell}(r)$  – радиальная волновая функция, удовлетворяющая уравнению

$$\left( \hat{T}_r + V(r) + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} \right) R_{n\ell}(r) = ER_{n\ell}(r).$$

Здесь  $\hat{T}_r$  – радиальная часть оператора кинетической энергии.

В произвольном центрально-симметричном поле все состояния вырождены по проекции орбитального момента, причем кратность вырождения состояний для бесспиновой частицы есть  $g = 2\ell + 1$ .

Приняты следующие обозначения

$$\ell = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, \dots$$

$$s, p, d, f, g, h, i, \dots$$

2. Кеплерова задача:  $V(r) = -Ze^2/r$ .

Дискретные уровни энергии:

$$E_n = -Z^2 \frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -Z^2 \frac{Ry}{(n_r + \ell + 1)^2}.$$

Здесь  $n_r = n - \ell - 1$  – радиальное квантовое число, определяющее число узлов радиальной волновой функции.

В кулоновском поле состояния вырождены также по орбитальному моменту (т. н. «случайное» вырождение), причем кратность вырождения состояний бесспиновой частицы есть

$$g = \sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell + 1) = n^2.$$

Общее представление для радиальной волновой функции ( $a_0$  – боровский радиус):

$$R_{n\ell}(r) = r^\ell \exp\left(-\frac{Zr}{na_0}\right) (b_0 + b_1 r + b_2 r^2 + \dots + b_{n_r} r^{n_r}).$$

В частности,

$$R_{10}(\xi) = 2 \exp(-\xi),$$

$$R_{20}(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( 1 - \frac{1}{2} \xi \right) \exp(-\xi/2), \quad R_{21}(\xi) = \frac{1}{2\sqrt{6}} \xi \exp(-\xi/2),$$

$$R_{30}(\xi) = \frac{2}{3\sqrt{3}} \left( 1 - \frac{2}{3} \xi + \frac{2}{27} \xi^2 \right) \exp(-\xi/3),$$

$$R_{31}(\xi) = \frac{8}{27\sqrt{6}} \xi \left( 1 - \frac{1}{6} \xi \right) \exp(-\xi/3), \quad R_{32}(\xi) = \frac{4}{81\sqrt{30}} \xi^2 \exp(-\xi/3).$$

Здесь  $\xi = Zr/a_0$ .

Радиальные волновые функции являются вещественными и нормированы согласно условию

$$\int_0^{\infty} R_{nl}^2(\xi) \xi^2 d\xi = 1.$$

### Задачи

**5.1(62).** Определить среднее и наиболее вероятное удаление электрона от ядра в атоме водорода, находящемся в состояниях  $2s$  и  $2p$ .

### Решение

Указанные состояния описываются радиальными волновыми функциями  $R_{2s}(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( 1 - \frac{1}{2} \xi \right) \exp(-\xi/2)$ ,  $R_{2p}(\xi) = \frac{1}{2\sqrt{6}} \xi \exp(-\xi/2)$ .

Здесь  $\xi = r/a_0$  — безразмерная радиальная координата. Радиальное распределение плотности вероятности обнаружения электрона, получаемое интегрированием объемной плотности вероятности по углам, описывается выражением:

$$\rho(\xi) d\xi = \int_{\Omega} |\Psi(r, \theta, \varphi)|^2 \xi^2 d\xi d\Omega = \xi^2 R^2(\xi) d\xi.$$

Наиболее вероятное значение удаления электрона от атомного ядра получим из условия максимума плотности вероятности:

$$\frac{\partial \rho}{\partial \xi} = 0.$$

Для  $2s$  состояния имеем:

$$\frac{\partial}{\partial \xi}(\rho_{2s}) = \text{const} \left[ 2 \left( 1 - \frac{1}{2} \xi \right)^2 - \xi \right] \frac{\xi}{2} \left( 1 - \frac{1}{2} \xi \right) \exp(-\xi) = 0.$$

Это уравнение имеет несколько корней:

$$\xi = 0, \quad \xi = 2 \quad \text{и} \quad \xi = 3 \pm \sqrt{5}.$$

При этом два первых корня этого уравнения соответствуют нулям плотности вероятности, т. е. ее минимумам, а вторые два – максимумам.

Поскольку  $\rho(3 - \sqrt{5}) < \rho(3 + \sqrt{5})$ , то наиболее вероятное значение радиальной координаты для  $2s$  состояния равно:  $r_{2s}^* = (3 + \sqrt{5})a_0$ .

Аналогично для  $2p$  состояния:

$$\frac{\partial}{\partial \xi}(\rho_{2p}) = \text{const} [4\xi^3 - \xi^4] \exp(-\xi) = 0.$$

Наиболее вероятное значение радиальной координаты для  $2p$  состояния равно:

$$r_{2p}^* = 4a_0.$$

Отметим, что это значение совпадает со значением радиуса второй боровской орбиты. В общем случае нетрудно показать, что радиус  $n$ -ной боровской орбиты  $r_n = n^2 a_0$  совпадает с наиболее вероятным удалением электрона от ядра для состояния  $|n, \ell = n - 1\rangle$ .

Учитывая, что в нашем случае волновая функция заранее нормирована на единичную вероятность, средние значения найдем, просто вычислив интегралы:

$$\langle r \rangle = \int r \rho(r) dr,$$

$$\langle r_{2s} \rangle = a_0 \frac{1}{8} \int_0^{+\infty} \xi^3 (2 - \xi)^2 \exp(-\xi) d\xi = \frac{a_0}{8} (\Gamma(6) - 4\Gamma(5) + 4\Gamma(4)) = 6a_0,$$

$$\langle r_{2p} \rangle = a_0 \frac{1}{24} \int_0^{+\infty} \xi^5 \exp(-\xi) d\xi = \frac{a_0}{24} \Gamma(6) = 5a_0.$$

**5.2(63).** Нарисовать радиальные волновые функции и распределения вероятности обнаружить электрон на расстоянии  $r$  от ядра в атоме водорода, находящимся в состояниях с главным квантовым числом  $n = 4$ .

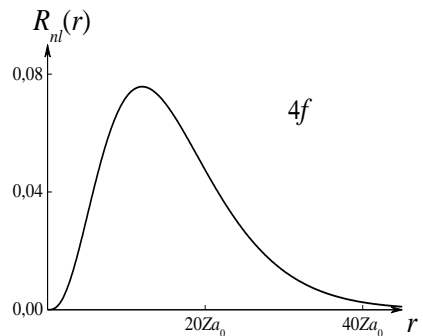
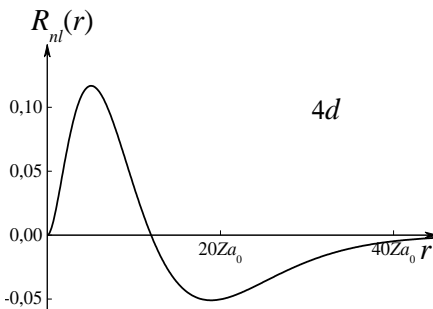
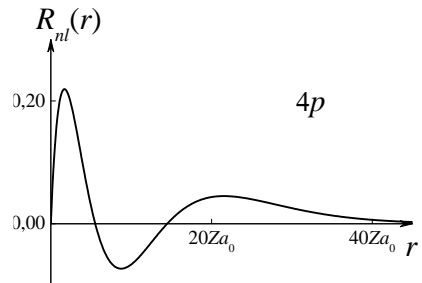
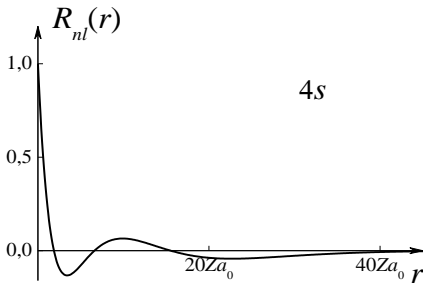


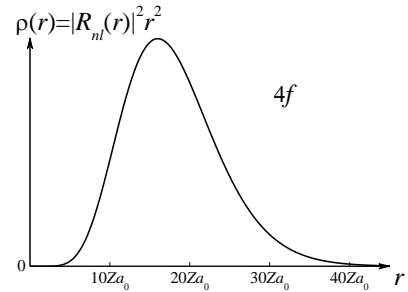
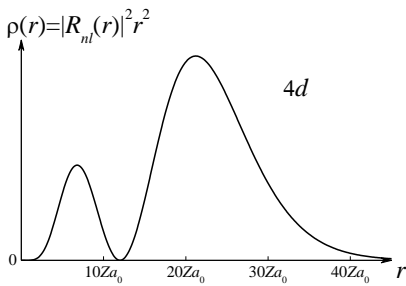
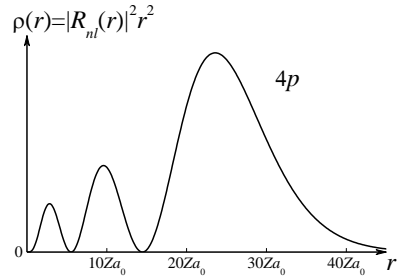
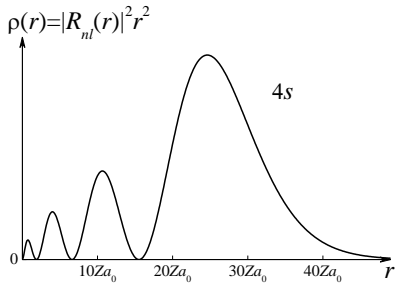
## Решение

В данной задаче вовсе не обязательно выписывать волновые функции всех указанных состояний в явном виде. Достаточно иметь представление об их виде. Радиальные волновые функции водородоподобного атома пропорциональны полиномам Лагерра, которые имеют в области  $r \geq 0$  ровно  $(n - \ell - 1)$  однократных нулей. Возможно всего четыре состояния с главным квантовым числом  $n = 4$ :  $4s, 4p, 4d, 4f$ . При этом следует отметить, что для всех  $s$  состояний значение волновой функции в точке  $r = 0$  отлично от нуля.

Распределения вероятности отличаются удвоенной кратностью нулей, кроме того, в них присутствует множитель  $r^2$ , за счет чего максимумы распределения смещаются в сторону больших значений радиальной координаты.

Ниже приведены радиальные волновые функции задачи Кеплера и соответствующие им радиальные плотности вероятности.





**5.3(64).** Определить вектор плотности тока вероятности для циркулярного состояния ( $m_\ell = \ell$ ,  $\ell = n - 1$ ) атома водорода. Полученное выражение сравнить с классической величиной электрического тока, создаваемого электроном в атоме водорода, движущимся по круговой орбите.

### Решение

Вектор плотности тока вероятности определяется выражением, приведенным в главе 4:  $\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*)$ . Учитывая выражение для градиента в сферической системе координат

$$\nabla = \vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \vec{e}_\varphi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi},$$

для вектора плотности вероятности состояния в атоме водорода, характеризуемом квантовыми числами  $n, \ell, m_\ell$ , получим

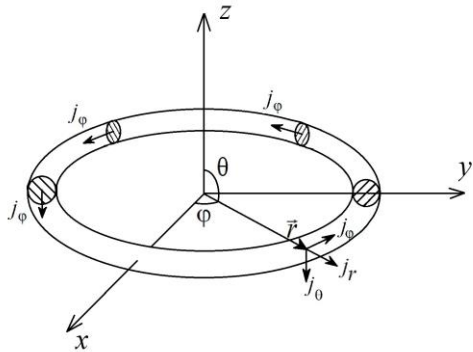
$$j_\varphi = \frac{\hbar}{2mir \sin \theta} \left( R_{n\ell}(r) P_\ell^{(m_\ell)}(\cos \theta) \right)^2 (2m_\ell i) = \frac{\hbar m_\ell}{mr \sin \theta} |\Psi_{n\ell m_\ell}|^2;$$

остальные компоненты вектора плотности тока вероятности равны нулю.

Таким образом, для состояний, с отличным от нуля значением проекции орбитального момента, вокруг ядра циркулирует ток вероятности (см. рисунок)

Для циркулярных состояний угловая часть волновой функции имеет вид  $P_\ell^{(m)}(\cos\theta) \propto \sin^\ell \theta$ , а радиальная плотность вероятности  $\rho(r) \propto r^2 R_{n\ell}^2(r) \propto r^{2\ell+2} \exp\left(-\frac{2Zr}{na_0}\right)$  не содержит нулей на радиальной оси

и имеет один четко выраженный максимум при значении радиальной координаты, равном радиусу  $n$ -ной боровской орбиты  $r_n = n^2 a_0$ . При больших значениях  $\ell$  данное распределение оказывается «плоским», т. е. ток циркулирует вокруг ядра в плоскости  $z = 0$ , учет радиального распределения  $R_{n,n-1}^2(r)$  приводит к тому, что этот ток локализован преимущественно в



области, удаленной на расстояние  $n^2 a_0$  от ядра. Кроме того, для рассматриваемых состояний  $\hbar m_\ell \approx L$ , а тогда выражение для плотности тока вероятности переходит в  $j_\phi = v\rho$ ,

т. е. при домножении на заряд электрона достаточно хорошо по смыслу соответствует классическому, в котором плотность тока локализована в плоскости орбиты электрона.

Таким образом, рассматриваемое нами состояние представляет собой кольцевой ток, циркулирующий вокруг ядра, и по своей структуре напоминает кольцо Сатурна.

Отметим, что в  $s$ -состояниях, а также в состояниях с нулевой проекцией орбитального момента ( $m_\ell = 0$ ) плотность тока вероятности равна нулю. Такие состояния являются существенно неклассическими.

**5.4(65).** Определить заряд ядра  $Z$  водородоподобного иона, при котором величины изотопического сдвига, связанные с конечной массой и конечным размером ядра, совпадают. Оценку провести в

предположении, что число протонов и нейтронов в ядре одинаково, а радиус ядра связан с его массовым числом соотношением  $R \approx 1.2 \cdot 10^{-13} \cdot A^{1/3}$  (см).

### Решение

Поправку к энергии основного состояния, связанную с конечной массой ядра, мы уже получали в задаче 2.14:  $\delta E_{\text{масс}} = RyZ^2(m/M_{\text{я}})$ . В предположении о том, что число нейтронов в ядре равно числу протонов, получим:

$$\delta E_{\text{масс}} = RyZ(m/(M_p + M_n)) \approx RyZ(m/2M_p).$$

Теперь перейдем к вычислению поправки, связанной с конечным размером ядра.

Потенциал, создаваемый ядром конечных размеров  $V(r)$ , отличается от потенциала точечного заряда  $Ze$  только внутри атомного ядра. Поэтому поправка к энергии будет существенна только для  $s$  состояний, так как все остальные «отодвинуты» от центра потенциала за счет центробежного барьера.

Поправку к энергии описанных состояний мы будем искать по теории возмущений. При этом за счет того, что характерный размер локализации волновой функции  $a_0$  (боровский радиус) сильно превышает размер ядра, можно считать, что волновая функция внутри ядра изменяется слабо и примерно постоянна во всей области интегрирования. Это дает:

$$\Delta E_{ns} = \int_{V_N} |\psi_{ns}(r)|^2 (V(r) + Ze^2/r) d^3r \approx |\psi_{ns}(0)|^2 \int_{V_N} (V(r) + Ze^2/r) d^3r.$$

Выразим поправку к энергии через плотность распределения заряда в ядре, считая последнее сферически симметричным.

$$\begin{aligned} \Delta E_{ns} &\approx -e|\psi_{ns}(0)|^2 \int (\varphi(r) + Ze/r) d^3r = \\ &= -\frac{1}{6} e|\psi_{ns}(0)|^2 \int (\varphi(r) + Ze/r) \Delta r^2 d^3r. \end{aligned}$$

Здесь потенциальная энергия электрона  $V(r) = -e\varphi(r)$  выражена через потенциал, создаваемый ядром, и использовано тождество  $\Delta r^2 = 6$ . Последнее выражение можно преобразовать, используя вторую формулу Грина и учитывая, что на поверхности шара подынтегральная функция и ее нормальная производная обращаются в ноль. Тогда с учетом уравнения Пуассона  $\Delta\varphi(r) = -4\pi\rho(r)$ :

$$\Delta E_{ns} \approx \frac{(4\pi)^2}{6} e |\psi_{ns}(0)|^2 \int_0^R \rho(r) r^4 dr,$$

где также было учтено, что  $\Delta \frac{1}{r} = -4\pi\delta(\vec{r})$ .

В предположении о том, что ядро имеет форму шара и положительный заряд распределен по ядру равномерно, потенциал, создаваемый им в пространстве, есть:

$$V(r) = \begin{cases} -Ze^2/r, & r > R, \\ -Ze^2/2R \cdot (3 - r^2/R^2), & r \leq R, \end{cases}$$

а распределение заряда внутри ядра:  $\rho(r) = 3Ze/4\pi R^3$ .

Тогда, используя любую из полученных формул и учитывая, что  $|\psi_{1s}(0)| = Z^3/\pi a_0^3$ , для поправки к уровню энергии основного состояния получим:

$$\Delta E_{1s} \approx \frac{2}{5} \frac{Z^4 e^2}{a_0^3} R^2 = \frac{4}{5} Z^4 Ry (R/a_0)^2.$$

Приравнявая два полученных выражения, имеем равенство для определения искомого заряда ядра:

$$Ry Z^* (m/2M_p) = \frac{4}{5} (Z^*)^4 Ry (1.2 \cdot 10^{-13} (2Z^*)^{1/3} / a_0 [\text{см}])^2.$$

В итоге заряд ядра, при котором сравниваются по величине обсуждаемые в данной задаче поправки, составляет:

$$Z^* = \left( \frac{5}{8 \cdot 2^{2/3}} \left[ \frac{a_0 [\text{см}]}{1.2 \cdot 10^{-13}} \right]^2 \frac{m}{M_p} \right)^{3/11} \approx 34.$$

**5.5(66).** Атом щелочного металла можно рассматривать, как одноэлектронную систему, в которой единственный электрон движется в поле атомного остова, представляющего ядро с зарядом  $Z$  и совокупность  $Z - 1$  электронов. Оценить размер атомного остова  $R_{core}$  атома лития ( $Z = 3$ ), считая, что по объему остова отрицательный заряд распределен равномерно. Потенциал ионизации атома лития  $I = 5.39$  эВ.

### Решение

Данную задачу можно решить аналогично предыдущей. Потенциальную энергию внешнего электрона, которая имеет вид

$$V(r) = \begin{cases} -e^2/r, & r > R_{core}, \\ -3e^2/r + 2e^2/2R_{core} \cdot (3 - r^2/R_{core}^2), & r \leq R_{core}, \end{cases}$$

можно представить следующим образом:  $V(r) = -e^2/r + \delta U(r)$ .

Здесь величина  $\delta U(r) = -2e^2/r + e^2/R_{core} \cdot (3 - r^2/R_{core}^2)$  представляет собой поправку к потенциальной энергии внешнего электрона внутри электронного облака. Тогда в первом порядке теории возмущений потенциал ионизации должен отличаться от величины  $|E_{2s}| = Ry/4$  (которая соответствует потенциалу ионизации  $2s$  состояния атома водорода) на поправку:

$$\Delta E = \int_{V_{core}} |\psi_{2s}(r)|^2 (\delta U(r)) d^3r.$$

Вычислим ее:

$$\begin{aligned} \Delta E &= \int_0^{R_{core}} \frac{1}{2} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right)^2 \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right) \left(-\frac{2e^2}{r} + \frac{e^2}{R_{core}} \cdot (3 - r^2/R_{core}^2)\right) \frac{r^2 dr}{a_0^3} = \\ &= Ry \int_0^{R_{core}/a_0} \left(1 - \frac{1}{2}\xi\right)^2 \exp(-\xi) \left(-\frac{2}{\xi} + \frac{a_0}{R_{core}} \cdot (3 - \xi^2 a_0^2/R_{core}^2)\right) \xi^2 d\xi. \end{aligned}$$

Последний интеграл можно вычислить аналитически и получить:

$$\Delta E = Ry \left[ -2(84 - 6\beta^2 + \beta^3) + 3 \exp(-\beta)(56 + \beta(56 + \beta(24 + \beta(6 + \beta)))) \right] / 2(\beta)^3,$$

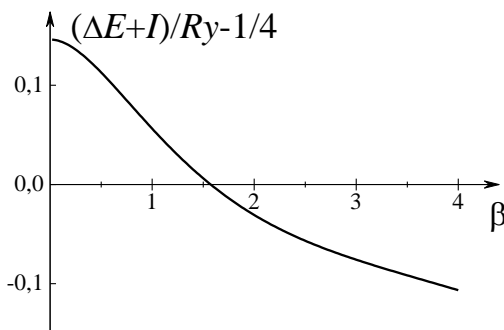
где введено обозначение:

$$\beta = \frac{R_{core}}{a_0}.$$

В результате задача сведется к решению трансцендентного уравнения с единственным параметром  $\beta$ :

$$-Ry/4 + \Delta E(\beta) = -I,$$

которое можно точно решить только численно. Графическое решение этого уравнения



представлено на рисунке. Как видно из рисунка, корень этого уравнения  $R_{core}/a_0 \approx 1.54$ . Таким образом, размер остова атома лития можно оценить как  $R_{core} \cong 0.81 \text{ \AA}$ .

**5.6(67).** Определить энергии стационарных состояний в центрально-симметричном потенциале  $V(r) = -\frac{e^2}{r} - \frac{e^2 a_0}{r^2}$ , где  $a_0$  – борковский радиус.

### Решение

Важным свойством приведенного потенциала является его центральная симметричность. Это позволяет нам опустить отделение угловой части волновой функции, что является стандартной процедурой для задач с центральной симметрией. Уравнение Шредингера для радиальной части волновой функции частицы, находящейся в центральном потенциале имеет вид:

$$\left( \hat{T}_r + V(r) + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} \right) R(r) = ER(r),$$

где  $\hat{T}_r$  – радиальная часть оператора кинетической энергии.

Подставим в уравнение заданный потенциал:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (rR(r)) + \left( -\frac{e^2}{r} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1) - 2me^2 a_0}{2mr^2} \right) R = ER(r).$$

Особая зависимость добавки к потенциальной энергии от расстояния ( $\propto r^{-2}$ ), которая отличает систему от атома водорода, позволяет нам формально ввести значение эффективного орбитального квантового числа  $\ell^*$ :

$$\hbar^2 \ell^* (\ell^* + 1) = \hbar^2 \ell(\ell+1) - 2me^2 a_0.$$

При этом для всех состояний, кроме состояний с нулевым моментом, задача после этого абсолютно аналогична задаче об атоме водорода с заменой  $\ell \rightarrow \ell^* = -\frac{1}{2} + \sqrt{\ell(\ell+1) - 7/4} \Big|_{\ell \geq 1}$ , т. е. уровни энергии такой системы будут описываться выражениями:

$$E_{n,\ell} = -Ry \frac{1}{(n_r + \ell^* + 1)^2} = -Ry \frac{1}{(n - \Delta_\ell)^2},$$

где  $\Delta_\ell = \ell - \ell^*$  – квантовый дефект. Для больших  $\ell$  имеем  $\ell^* \approx \ell - 7/(8\ell)$ , т. е.  $\Delta_\ell = 7/(8\ell)$ . Как видно, с увеличением орбитального момента величина квантового дефекта убывает, и спектр становится водородоподобным. Отметим, что дополнительное взаимодействие снимает «случайное» вырождение по орбитальному моменту, причем состояния с меньшим значением орбитального момента сдвигаются вниз по сравнению с их положением в задаче Кеплера. Это обстоятельство на качественном уровне позволяет понять очередность заполнения электронами оболочек и подоболочек в многоэлектронном атоме.

Что же касается  $s$ -состояний, то для них требуется дополнительное исследование, так как зависимость потенциальной энергии от  $r$  в этом случае имеет принципиально другой вид по сравнению с задачей Кеплера: в начале координат оказывается усиленный центр притяжения.

**5.7(68).** Мюон ( $m_\mu \cong 207 m_e$ ) находится в поле тяжелого атомного ядра ( $z = 92$ ,  $A = 238$ ). Определить приближенный вид волновой функции основного состояния и оценить потенциал ионизации такой системы. Считать распределение заряда в пределах ядра равномерным. Радиус ядра связан с его массовым числом соотношением  $R \approx 1.2 \cdot 10^{-13} \cdot A^{1/3}$  (см).

### Решение

В данном случае задача явно касается так называемых «внутренних орбит» - состояний мюона с высокой плотностью вероятности находящихся внутри ядра. Критерием этого является выполнение условия:

$$(r_0)_\mu = \frac{m_e}{m_\mu} \frac{a_0}{Z} = \frac{a_\mu}{Z} < R \approx 1.2 \cdot 10^{-13} \cdot A^{1/3}.$$

Боровский радиус мюонного атома водорода есть  $a_\mu = \hbar^2 / m_\mu e^2 \approx a_0 / 207 \approx 2.5 \cdot 10^{-11}$  см. Для приведенных в условии задачи значений величин  $Z$  и  $A$  сформулированное неравенство, очевидно, выполнено. Поэтому в тяжелой ( $A \gg 1$ ) системе мюон оказывается локализован преимущественно внутри атомного ядра. Таким образом, в задаче необходимо каким-то образом учитывать внутреннюю структуру ядра.

Самый простой способ – это предположение о том, что ядро имеет сферическую форму и его заряд равномерно распределен по объему. В этом случае потенциал, создаваемый ядром конечных размеров, есть:



$$V(r) = \begin{cases} -Ze^2/r, & r > R, \\ -Ze^2/2R \cdot (3 - r^2/R^2), & r \leq R, \end{cases}$$

и отличается от потенциала точечного заряда  $Ze$  только внутри атомного ядра. При этом в данной задаче отличие потенциала от кулоновского не является малым, а, напротив, дает основной вклад в положение основного уровня энергии, так как мюон в основном состоянии локализован как раз внутри ядра.

Предполагая, что основное состояние мюона является  $s$ -состоянием, уравнение Шредингера запишем в виде:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_\mu} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (r\psi) - \left( \frac{3Ze^2}{2R} - \frac{1}{2} \frac{Ze^2 r^2}{R^3} \right) \psi = E\psi.$$

Приведенное уравнение является уравнением для радиальной части волновой функции трехмерного гармонического осциллятора с частотой  $\Omega^2 = Ze^2/(m_\mu R^3)$  и со смещением уровня отсчета энергии на величину

$$-\frac{3Ze^2}{2R}.$$

Приближенно считая волновую функцию мюона соответствующей основному состоянию в осцилляторном потенциале, для потенциала ионизации получим:

$$I = \frac{3Ze^2}{2R} - \frac{3}{2} \hbar\Omega = \frac{3Ze^2}{2R} \left( 1 - \sqrt{\frac{a_\mu}{ZR}} \right).$$

Подставляя численные значения, получим  $I \approx 10.4$  МэВ.

Приближенный вид волновой функции внутри ядра должен быть близок к

$$\psi(r) \propto \exp\left(-\frac{m_\mu \Omega}{2\hbar} r^2\right),$$

а на больших расстояниях переходить в экспоненциальное затухание:  $\psi(r) \propto \exp(-r/a_\mu)$ .

**5.8(69).** Оценить амплитуду «дрожания» электрона на орбите, приводящую к лэмбовскому сдвигу атомных уровней, если известно, что разница энергий  $2s_{1/2}$ - и  $2p_{1/2}$ -состояний в атоме водорода равна

$$\delta E \approx \frac{1}{3\pi} \cdot \alpha^3 R_y.$$

**Решение**

Очевидно, что постоянного смещения электрона на орбите под воздействием случайного возмущения не происходит. Таким образом, среднее значение отклонения  $\langle \delta \vec{r} \rangle$  равно нулю и амплитуду «дрожания» можно оценить с помощью величины  $\sqrt{\langle \delta \vec{r}^2 \rangle}$ .

Смещение электрона будет влиять на значение его потенциальной энергии в поле ядра, а значит и на положение уровней энергии. Потенциальная энергия электрона в поле ядра при учете смещения

$$V^*(r) = -e\Phi(\vec{r} + \delta\vec{r}) \approx -e\left(1 + (\delta\vec{r} \cdot \vec{\nabla}) + (\delta\vec{r} \cdot \vec{\nabla})^2/2 + \dots\right)\Phi(\vec{r}),$$

где последнее равенство получено разложением в ряд Тейлора с учетом малости величины «дрожания», а  $\Phi(\vec{r})$  – создаваемый ядром электростатический потенциал. После усреднения с учетом равноправия всех трех координат в случае центрального поля получим:

$$V^*(r) \approx -e\left(1 + \frac{1}{6}\langle \delta \vec{r}^2 \rangle \Delta\right)\Phi(r),$$

т. е. в случае учета смещения электрона возникает добавка к потенциальной энергии. Сдвиг энергетических уровней будет достаточно точно описываться усредненной по квантовому состоянию величиной добавки (первый порядок теории возмущений):

$$\Delta E_{n\ell} = \int (V^* - V) |\psi_{n\ell}(r)|^2 d^3r = \int |\psi_{n\ell}(r)|^2 \Delta\Phi d^3r.$$

С учетом того, что

$$\Delta\Phi(r) = -4\pi\rho(r) = -4\pi e\delta(\vec{r}),$$

данный интеграл может быть вычислен аналитически:

$$\Delta E_{n\ell} = 4\pi \frac{e^2}{6} |\psi_{n\ell}(0)|^2 \langle \delta \vec{r}^2 \rangle.$$

В результате, как и в случае с поправкой на конечный размер ядра, значительное смещение здесь испытывают только  $s$ -уровни, так как только для них существует достаточно большая вероятность нахождения электрона вблизи силового центра. Таким образом

$$\Delta E_{ns} = 4\pi \frac{e^2}{6} \frac{1}{\pi a_0^3 n^3} \langle \delta \vec{r}^2 \rangle.$$

Используя условие задачи, можем оценить амплитуду «дрожания» электрона на орбите:

$$\Delta E_{2s} \approx \delta E \Rightarrow \langle \delta \vec{r}^2 \rangle = a_0^2 \left( \frac{2^3 \alpha^3}{4\pi} \right) \Rightarrow \sqrt{\langle \delta \vec{r}^2 \rangle} = a_0 \cdot \alpha^{3/2} \sqrt{2/\pi}.$$

Численное значение полученной величины:

$$\sqrt{\langle \delta \bar{r}^{-2} \rangle} = a_0 \cdot \alpha^{3/2} \sqrt{2/\pi} \approx a_0 \cdot 5 \cdot 10^{-4} \approx 2.6 \cdot 10^{-12} \text{ см.}$$

Важно отметить, что полученная амплитуда дрожания, обусловленная взаимодействием атомного элеткрона с электромагнитным вакуумом, существенно превышает размер атомного ядра (протона).

**5.9(70).** Длина волны излучения, соответствующая переходам между компонентами сверхтонкой структуры основного состояния атома водорода, равна  $\lambda_H = 21.1$  см. Определить длину волны перехода между компонентами сверхтонкой структуры атома дейтерия  $\lambda_D$ , если известно спин протона  $I_p = 1/2$ , спин дейтрона  $I_D = 1$ , а гиромагнитные отношения для протона и нейтрона соответственно равны  $g_p = 5.6$ ,  $g_n = -3.8$ .

### Решение

Сверхтонкая структура спектра атома водорода (дейтерия) возникает за счет взаимодействия магнитных дипольных моментов электрона и атомного ядра (протона или дейтрона). При этом в случае основного состояния (1s) магнитный момент электрона равен спиновому моменту. Поскольку спиновый момент электрона может как «параллелен», так и «антипараллелен» вектору механического момента атомного ядра, сверхтонкая структура основных состояний водорода и дейтерия состоит из двух компонент, причем квантовое число  $F$  полного механического момента атома принимает значения  $F = 0, 1$  для атома водорода и  $F = 1/2, 3/2$  для атома дейтерия. Величина расщепления может быть найдена из правила интервалов Ланде:

$$\Delta E_H = B_H \text{ и } \Delta E_D = B_D \cdot 3/2,$$

где  $B_H, B_D$  – константа связи для атомов водорода и дейтерия. Эти константы отличаются вследствие различной величины магнитных моментов протона и дейтрона. При этом нам не нужно знать сами константы, а достаточно найти их отношение, которое будет зависеть только от гиромагнитных отношений протона и дейтрона. Для протона гиромагнитное отношение приведено в условии задачи. Найдем аналогичную величину для дейтрона.

Эффективный магнитный момент системы, состоящей из двух подсистем – это компонента суммарного магнитного момента, коллинеарная полному моменту импульса

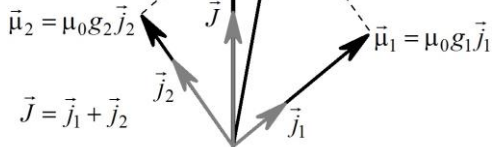
$$\langle \vec{\mu} \rangle = \mu_0 g \vec{J} \quad \vec{\mu} = \vec{\mu}_1 + \vec{\mu}_2$$

$$\langle \vec{\mu} \rangle = \frac{(\vec{\mu}_J \cdot \vec{J}) \cdot \vec{J}}{|\vec{J}|^2} = \mu_0 g \vec{J},$$

где  $\vec{J} = \vec{j}_1 + \vec{j}_2$ ,  $\vec{\mu} = \vec{\mu}_1 + \vec{\mu}_2$ ,

$\vec{\mu}_1 = \mu_0 g_1 \vec{j}_1$ ,  $\vec{\mu}_2 = \mu_0 g_2 \vec{j}_2$ , а

$g_1, g_2$  – гироманнитные отношения подсистем,  $\mu_0$  – магнетон Бора.



В этом случае прямой подстановкой несложно найти выражение для гироманнитного отношения такой композитной системы с учетом

выражения:  $(\vec{j}_1 \cdot \vec{j}_2) = (J(J+1) - j_1(j_1+1) - j_2(j_2+1))/2$ .

$$g = \frac{2g_1 j_1(j_1+1) + 2g_2 j_2(j_2+1) + (g_1 + g_2)(J(J+1) - j_1(j_1+1) - j_2(j_2+1))/2}{2J(J+1)} =$$

$$= g_1 + \frac{g_2 - g_1}{2J(J+1)} (J(J+1) - j_1(j_1+1) + j_2(j_2+1)) =$$

$$= g_2 + \frac{g_1 - g_2}{2J(J+1)} (J(J+1) + j_1(j_1+1) - j_2(j_2+1)).$$

Таким образом, магнитный момент дейтрона можно записать в виде:

$\vec{\mu}_D = \mu_N \frac{g_p + g_n}{2} \vec{I}_D$ , где  $\mu_N$  – ядерный магнетон Бора. А для отношения констант связи получим

$$B_D/B_H = \frac{g_p + g_n}{2g_p},$$

откуда

$$\Delta E_D/\Delta E_H = \frac{3}{4} \frac{g_p + g_n}{g_p} \approx 0.235.$$

Следовательно,  $\lambda_D \approx 4.26 \lambda_H \approx 89.9$  см.

Экспериментальное значение длины волны обсуждаемого перехода есть  $\lambda_D^{(\text{exp})} = 91.5$  см.

В рамках нашей модели мы можем также ожидать, что для сверхтяжелого изотопа водорода (третия), имеющего спин ядра  $I_T = 1/2$  и магнитный момент  $\vec{\mu}_T = \mu_N g_p \vec{I}_T$ , величина сверхтонкого расщепления

должна быть такой же, как и в атоме водорода  $\lambda_T \approx \lambda_H$ . Экспериментальные данные подтверждают это предположение:  $\lambda_T^{(\text{exp})} = 19.8$  см.

**Примечание.** Более подробное обсуждение вопросов, связанных со сложением моментов и изучением тонкой и сверхтонкой структур, можно найти в главе 7.

## Глава 6. Электромагнитные переходы

1. В электрическом дипольном приближении оператор взаимодействия атомной системы с полем электромагнитной волны записывается как

$$\hat{W}(\vec{r}, t) = -(\vec{d}\vec{E}(t)),$$

где  $\vec{d}$  – электрический дипольный момент системы,  $\vec{E}$  – электрическое поле волны, полагаемое пространственно однородным.

2. Амплитуда вероятности перехода за время  $t-t^*$  из некоторого начального стационарного состояния  $\varphi_i$  атомного гамильтониана  $\hat{H}_0$  в конечное состояние  $\varphi_f$ , обусловленного внешним воздействием на систему  $\hat{W}(\vec{r}, t)$ , в первом порядке теории возмущений есть

$$C_{fi}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_{t^*}^t \langle \varphi_f | \hat{W}(\vec{r}, t) | \varphi_i \rangle \exp(i\omega_{fi}t') dt' = -i \frac{\vec{d}_{fi}}{\hbar} \int_{t^*}^t \vec{E}(t') \exp(i\omega_{fi}t') dt',$$

где  $\omega_{fi} = (E_f - E_i)/\hbar$  – частота перехода,  $d_{fi}$  – матричный элемент оператора дипольного момента,  $t^*$  – некоторый начальный момент времени.

Во втором порядке теории возмущений:

$$C_{fi}^{(2)}(t) = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \sum_n \int_{t^*}^t dt' \langle \varphi_f | \hat{W}(\vec{r}, t') | \varphi_n \rangle \exp(i\omega_{fn}t') \int_{t^*}^{t'} dt'' \langle \varphi_n | \hat{W}(\vec{r}, t'') | \varphi_i \rangle \exp(i\omega_{ni}t''),$$

где суммирование проводится по всем промежуточным состояниям системы.

3. Коэффициент Эйнштейна вынужденного перехода определяется таким образом, что  $B_{fi}I_\omega$  – вероятность вынужденного (индуцированного) перехода  $i \rightarrow f$  в единицу времени;  $I_\omega$  – спектральная интенсивность излучения на частоте перехода.

4. Спонтанные переходы. Коэффициент Эйнштейна спонтанного перехода из начального состояния  $\varphi_i$  в состояние  $\varphi_f$ :

$$A_{fi} = \frac{4\omega^3}{3\hbar c^3} |d_{fi}|^2.$$

Здесь  $\omega = (E_i - E_f)/\hbar$  – частота перехода.

5. Связь между коэффициентами Эйнштейна:

$$A_{fi} = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^2} B_{fi}.$$

6. Естественная ширина линии перехода  $2 \rightarrow 1$

$$\Delta\nu \approx 1/\tau = A_{12},$$

$\tau$  – среднее время жизни атома относительно перехода  $2 \rightarrow 1$ .

### Задачи

**6.1(71).** Электрон находится в бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме в основном состоянии. В первом порядке теории возмущений определить вероятность перехода в нижнее возбуждённое состояние в поле лазерного импульса с гауссовой огибающей

$E = E_0 \exp\left(-\frac{t^2}{2\tau^2}\right) \cos(\omega_0 t)$ . Считать, что частота излучения удовлетворяет

условиям  $\omega_0 \tau \gg 1$ ,  $|\omega_{21} - \omega_0|/\omega_0 \ll 1$ . Здесь  $\omega_{21} = (E_2 - E_1)/\hbar$  – частота перехода между основным и нижним возбуждённым состояниями. Исследовать зависимость вероятности возбуждения от длительности лазерного импульса.

### Решение

Амплитуда вероятности перехода есть

$$C_{21}(t) \approx i \frac{d_{21} E_0}{2\hbar} \int_{-\infty}^t \exp\left(-t^2/2\tau^2\right) \cos(\omega_0 t) \exp(i\omega_{21} t) dt.$$

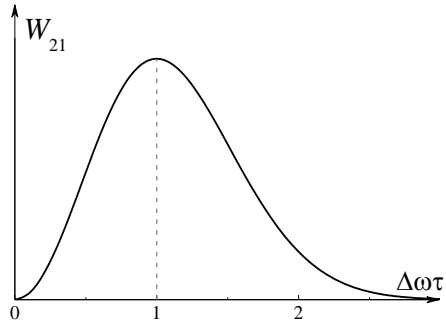
К концу лазерного импульса ( $t \rightarrow \infty$ ) с учетом условий  $|\omega_{21} - \omega_0|/\omega_0 \ll 1$  и  $\omega_0 \tau \gg 1$  имеем:

$$\begin{aligned} C_{21}(\infty) &\approx i \frac{d_{21} E_0}{2\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-t^2/2\tau^2\right) \exp(i(\omega_{21} - \omega_0)t) dt = \\ &= i \frac{d_{21} E_0}{2\hbar} \sqrt{2\pi} \tau \exp\left(-(\omega_{21} - \omega_0)^2 \tau^2 / 2\right). \end{aligned}$$

Поэтому  $W_{21} = |C_{21}|^2 \approx \frac{|d_{21}|^2 E_0^2}{4\hbar^2} 2\pi \tau^2 \exp\left(-(\omega_{21} - \omega_0)^2 \tau^2\right)$ .

Зависимость вероятности возбуждения от длительности импульса  $W_{21}(\tau)$  является немонотонной функцией и приведена на рисунке. Максимум вероятности достигается при  $\xi = \Delta\omega\tau = 1$  (здесь  $\Delta\omega = \omega_{21} - \omega_0$  – отстройка).

На первый взгляд кажется странным, что с увеличением длительности импульса в области  $\xi > 1$  вероятность возбуждения убывает. Физическая причина этого заключается в том, что с увеличением длительности импульса происходит его монохроматизация, т. е. уменьшение спектральной ширины, в результате чего для заданной величины отстройки  $\Delta\omega = \omega_{21} - \omega_0$  условие резонантности воздействия (ширина спектра излучения больше отстройки  $\Delta\omega$ ) нарушается.



**6.2(72).** В дипольном приближении определить вероятности спонтанных переходов между стационарными состояниями частицы с зарядом  $e$  в гармоническом потенциале.

**Решение**

Вероятность спонтанного перехода из состояния  $|i\rangle$  в состояние  $|f\rangle$  в единицу времени в дипольном приближении есть не что иное, как коэффициент Эйнштейна  $A_{fi} = \frac{4\omega^3}{3\hbar c^3} |d_{fi}|^2$ ,  $d_{fi}$  – соответствующий матричный элемент оператора дипольного момента,  $\omega$  – частота перехода. В линейном одномерном гармоническом осцилляторе

$$d_{mn} = e \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m^*(x) x \psi_n(x) dx,$$

где  $\psi_n(\xi) = N_n H_n(\xi) \exp(-\xi^2/2)$ ,  $\xi = x\sqrt{m\omega/\hbar}$ . Воспользуемся рекуррентным соотношением для полиномов Эрмита:

$$\xi H_n(\xi) = n H_{n-1}(\xi) + \frac{1}{2} H_{n+1}(\xi),$$



$$d_{mn} = e\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} N_n N_m \int_{-\infty}^{+\infty} H_m(\xi) \left( nH_{n-1}(\xi) + \frac{1}{2}H_{n+1}(\xi) \right) \exp(-\xi^2) d\xi.$$

Из ортогональности полиномов Эрмита следует, что это выражение отлично от 0 только при  $m = n \pm 1$ . Так как спонтанные переходы совершаются с вышележащего уровня на нижележащий, для нас интересен случай  $m = n - 1$ .

$$d_{(n-1)n} = ne\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} N_n N_{n-1} \int_{-\infty}^{+\infty} H_{n-1}(\xi) H_{n-1}(\xi) \exp(-\xi^2) d\xi,$$

$$d_{(n-1)n} = ne\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{N_n}{N_{n-1}}.$$

Учитывая, что  $N_n = \sqrt{\frac{1}{2^n n! \sqrt{\pi}}}$ , получим  $d_{(n-1)n} = e\sqrt{n\hbar/2m\omega}$ .

Итак, спонтанные переходы в гармоническом осцилляторе в дипольном приближении возможны только на соседние уровни, причем вероятность перехода с уровня  $n$  в единицу времени равна

$$A_{(n-1)n} = \frac{2\omega^2 e^2}{3mc^3} \cdot n.$$

Интересно то, что в полученном результате отсутствует постоянная Планка. Это косвенно свидетельствует о том, что ответ может быть сведён к классическому. Действительно, коэффициент  $A_{(n-1)n}$  по своему физическому смыслу есть обратное время перехода между уровнями  $n$  и  $n-1$ . При этом энергия, запасённая в осцилляторе, уменьшается на величину  $\hbar\omega$ . С уровня  $n-1$  идёт переход на уровень  $n-2$  и так далее. В результате для энергии осциллятора в первом переходе можем записать соотношение

$$\frac{\Delta E}{\Delta t} = -A_{(n-1)n} \hbar\omega.$$

Учтём, что сама энергия, запасённая в осцилляторе (относительно энергии нулевых колебаний) равна  $E = n\hbar\omega$ :

$$\frac{\Delta E}{\Delta t} = -\frac{2\omega^2 e^2}{3mc^3} n\hbar\omega = -\frac{2\omega^2 e^2}{3mc^3} E.$$

Или в дифференциальной форме (рассуждения, приведённые выше, разумеется, являются лишь оценочными)

$$\frac{dE}{dt} = -\frac{2\omega^2 e^2}{3mc^3} E.$$

Замечательно, что в точности это же выражение для затухания колебаний заряженной частицы в гармоническом осцилляторе получается и из классических соображений (см. задачу 1.2).

**6.3(73).** В дипольном приближении определить вероятности спонтанных переходов между различными стационарными состояниями электрона в одномерной бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме.

### Решение

В выражении для соответствующего коэффициента Эйнштейна стоит квадрат модуля матричного элемента дипольного момента

$$d_{mn} = e \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m^*(x) x \psi_n(x) dx. \text{ Этот матричный элемент отличен от нуля}$$

только при переходах между состояниями с различной чётностью. Учитывая, что

$$\psi_n = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{n\pi x}{a}, & n = 1, 3, 5, \dots \\ \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}, & n = 2, 4, 6, \dots \end{cases}$$

где  $a$  – размер ямы, общий вид ненулевого матричного элемента можно

записать как  $d_{mn} = \frac{2e}{a} \int_{-a/2}^{a/2} \cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{m\pi x}{a}\right) x dx$ . При этом число  $n$

подразумевается нечётным, а  $m$  – чётным. Вычислим этот интеграл:

$$d_{mn} = \frac{e}{a} \int_{-a/2}^{a/2} \left( \sin\left(\frac{(m+n)\pi x}{a}\right) + \sin\left(\frac{(m-n)\pi x}{a}\right) \right) x dx,$$

$$d_{mn} = \frac{2ea}{\pi^2} \left[ \frac{1}{(m+n)^2} \sin\left((m+n)\frac{\pi}{2}\right) + \frac{1}{(m-n)^2} \sin\left((m-n)\frac{\pi}{2}\right) \right].$$

Так как разность аргументов синусов равна  $\pi n$ , где  $n$  – нечётное число, то слагаемые в скобках имеют разный знак. Поэтому

$$d_{mn}^2 = \frac{64}{\pi^4} e^2 a^2 \frac{m^2 n^2}{(m^2 - n^2)^4}.$$

Соответствующая вероятность спонтанного перехода

$$A_{fi} = \frac{32\pi^2 \hbar^2 e^2}{3M^3 c^3 a^4} \frac{m^2 n^2}{|m^2 - n^2|},$$

за  $M$  здесь обозначена масса частицы.

**6.4(74).** Показать, что в дипольном приближении для бесспиновой частицы в центрально – симметричном поле справедливы следующие правила отбора по магнитному квантовому числу  $\Delta m = 0, \pm 1$ .

### Решение

В дипольном приближении переход является запрещённым, если матричный элемент оператора дипольного момента для этого перехода равен нулю. Стационарное уравнение Шрёдингера в центрально-симметричном поле допускает разделение переменных. Его решение, или волновая функция стационарного состояния, может быть представлено в виде

$$\psi(r, \theta, \phi) = N_\ell R_{\alpha\ell}(r) P_\ell^{(m)}(\cos\theta) e^{im\phi},$$

где  $N_\ell$  – нормировочный множитель,  $P_\ell^{(m)}(\cos\theta)$  – присоединённый полином Лежандра. Индекс  $\alpha$  служит для нумерации радиальных волновых функций. Он аналогичен главному квантовому числу в атоме водорода, но может быть использован как для обозначения связанных состояний, так и состояний континуума. Матричный элемент вектора дипольного момента для двух таких состояний можно записать как

$$\begin{aligned} \vec{d}_{fi} &= e \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_f^*(\vec{r}) \vec{r} \psi_i(\vec{r}) d^3 r, \\ \vec{d}_{fi} &= \vec{b} e N_\ell N_{\ell'} \int_0^\infty R_{\alpha\ell}^*(r) R_{\alpha'\ell'}(r) r r^2 dr, \end{aligned}$$

где вектор  $\vec{b}$  выражается через угловые части волновых функций:

$$\begin{aligned} b_x &= \int_0^\pi P_\ell^{(m)}(\cos\theta) P_{\ell'}^{(m')}(\cos\theta) \sin^2 \theta d\theta \int_0^{2\pi} e^{i(m-m')\phi} \cos \phi d\phi, \\ b_y &= \int_0^\pi P_\ell^{(m)}(\cos\theta) P_{\ell'}^{(m')}(\cos\theta) \sin^2 \theta d\theta \int_0^{2\pi} e^{i(m-m')\phi} \sin \phi d\phi, \\ b_z &= \int_0^\pi P_\ell^{(m)}(\cos\theta) P_{\ell'}^{(m')}(\cos\theta) \sin \theta \cos \theta d\theta \int_0^{2\pi} e^{i(m-m')\phi} d\phi. \end{aligned}$$

Из структуры этих интегралов, а вернее, их вторых множителей, видно, что компоненты  $b_x$  и  $b_y$  отличны от нуля только при  $m - m' = \pm 1$ , компонента  $b_z$  – только при  $m - m' = 0$ . Мы получили одно из необходимых условий того, что переход является разрешённым в дипольном приближении  $\Delta m = 0, \pm 1$ . Заметим, что это условие справедливо для переходов в любом центрально-симметричном потенциале.

**6.5(75).** Оценить время спонтанного перехода:

- а) соответствующего головной линии серии Лаймана;
- б) между компонентами сверхтонкой структуры основного состояния атома водорода. (Длина волны перехода  $\lambda = 21.1$  см).

### Решение

а) В данной задаче снова необходимо найти коэффициент Эйнштейна для спонтанного перехода. Однако, зная, что переход является разрешённым, в качестве грубой оценки мы можем положить матричный элемент дипольного момента  $d_{fi} \sim ea_0$ . Тогда время перехода будет иметь порядок

$$\tau = A_{fi}^{-1} \sim \left( \frac{Ry^3}{\hbar^4 c^3} e^2 a_0^2 \right)^{-1} \sim \frac{\hbar^4 c^3 a_0}{e^8} \sim \alpha^{-3} \frac{\hbar}{Ry}.$$

$$\tau \sim 2 \cdot 10^{-10} \text{ с.}$$

Полученный результат интересно сравнить с предсказаниями классической электродинамики (см. задача 1.6). Если оценивать по классической теории время падения электрона на ядро с круговой орбиты, соответствующей  $n = 2$ , то решение задачи 1.6 дает  $\tau_{cl} \sim 8 \cdot 10^{-10}$  с. Строгий квантовомеханический расчет для перехода  $2p \rightarrow 1s$  (см. задачу 6.6) дает  $\tau \approx 1.6 \cdot 10^{-9}$  с.

б) Сверхтонкая структура – следствие взаимодействия магнитного момента электрона с магнитным моментом ядра атома. Очевидно, что в электрическом дипольном приближении, о котором шла речь выше, переход между компонентами сверхтонкой структуры запрещён. Но он является разрешённым с точки зрения магнитного дипольного приближения. Выражение для вероятности перехода в магнитном дипольном приближении совпадает с аналогичным выражением, полученным в электрическом дипольном приближении, с точностью до замены матричного элемента электрического дипольного момента на матричный элемент магнитного дипольного момента системы.

Основной вклад в магнитный момент системы даёт электрон (величина магнетона обратно пропорциональна массе). Аналогично пункту (а) проведём оценку времени:

$$\tau = A_{fi}^{-1} \sim \left( \frac{4\omega^3}{3\hbar c^3} |\mu_B|^2 \right)^{-1} \sim \frac{m^2 c^2 \lambda^3}{8\pi^3 e^2 \hbar} \sim \alpha^{-2} \frac{\hbar}{Ry} \left( \frac{\lambda}{2\pi a_0} \right)^3.$$

$$\tau \sim 3 \cdot 10^{14} \text{ с.}$$

Полученное время очень велико (порядка одного миллиона лет). Однако именно этот переход в радиоастрономии используется для изучения распределения водорода во Вселенной.

**6.6(76).** Найти вероятность спонтанного перехода  $2p \rightarrow 1s$  в водородоподобном ионе с зарядом ядра  $Z$ . Спин-орбитальным взаимодействием пренебречь.

### Решение

Вероятность спонтанного перехода в единицу времени в электрическом дипольном приближении определяется коэффициентом Эйнштейна  $A_{fi}$ , который может быть вычислен как

$$A_{fi} = \frac{4\omega^3}{3\hbar c^3} |d_{fi}|^2,$$

где

$$\vec{d}_{fi} = e \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_f^*(\vec{r}) \vec{r} \psi_i(\vec{r}) d^3 r$$

(см. задачу 6.3).

Заметим, что состояние  $2p$  в водородоподобном ионе является вырожденным по проекции орбитального момента. Из центральной симметрии задачи следует, что вероятность спонтанного перехода не должна зависеть от магнитного квантового числа, а из того, что оператор электрического дипольного момента не зависит от спина, следует и спиновая независимость вероятности спонтанного перехода. Таким образом, при вычислении коэффициента Эйнштейна  $A_{fi}$  нам достаточно рассмотреть переход из состояния с одним значением  $m_\ell$ , например  $m_\ell = 0$ , в  $1s$ -состояние. Матричный элемент оператора дипольного момента может быть найден как

$$\bar{d}_{fi} = e \int_0^\infty R_{1s}(r) R_{2p}(r) r^3 dr \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \left( Y_{\ell=0}^{m_\ell=0}(\theta, \varphi) \right)^* Y_{\ell=1}^{m_\ell=0}(\theta, \varphi) \bar{e}_r,$$

где  $\bar{e}_r \equiv \frac{\bar{r}}{r} = \bar{i} \sin \theta \cos \phi + \bar{j} \sin \theta \sin \phi + \bar{k} \cos \theta$  – единичный вектор в направлении радиус-вектора. Соответствующие радиальные и угловые части волновых функций для водородоподобного иона выглядят следующим образом:

$$Y_{\ell=0}^{m_\ell=0}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}},$$

$$Y_{\ell=1}^{m_\ell=0}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta,$$

$$R_{1s}(r) = \sqrt{\frac{4Z^3}{a_0^3}} \exp(-Zr/a_0),$$

$$R_{2p}(r) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{Z^3}{6a_0^3}} \frac{Zr}{a_0} \exp(-Zr/2a_0).$$

Из трёх слагаемых в интеграле по углам в  $\bar{d}_{fi}$  отлична от нуля только z-компонента. Подставляя в выражения для  $\bar{d}_{fi}$  волновые функции и произведя интегрирование, получим

$$\bar{d}_{fi} = \bar{k} \frac{2^8}{3^5 \sqrt{2}} \frac{a_0 e}{Z}.$$

Частота перехода есть  $\omega = (1 - 1/2^2) Z^2 Ry / \hbar = 3Z^2 Ry / 4\hbar$ . Подставим полученные значения в формулу для  $A_{fi}$ :

$$A_{fi} = \left( \frac{2}{3} \right)^8 \alpha^4 Z^4 \frac{c}{a_0} = \frac{2^9}{3^8} \alpha^3 Z^4 \frac{Ry}{\hbar}.$$

Отметим еще раз, что классическая теория качественно правильно описывает время жизни атома в возбуждённом состоянии, в том числе, зависимость вероятности перехода от заряда ядра (см. задачу 1.6).

**6.7(77).** Показать, что в атоме гелия электро-дипольные переходы между синглетными и триплетными термами запрещены (запрет интеркомбинаций).

**Решение**

Запрет перехода между триплетными и синглетными термами следует из того, что оператор дипольного момента не действует на спиновую часть волновой функции и из ортогональности спиновых частей волновых функций синглетных и триплетных термов.

Это можно записать и подробнее. Волновые функции для термов гелия могут быть представлены в виде линейных комбинаций функций, факторизованных на спиновую и координатную части:

$$\Psi = \sum_{\alpha, \beta} C_{\alpha\beta} \Psi_{\alpha}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \chi_{\beta}(\sigma_1, \sigma_2),$$

где индексы  $\alpha, \beta$  нумеруют различные базисные координатные и спиновые части волновых функций,  $\sigma_i$  обозначают спиновые степени свободы. Спиновые волновые функции триплетного терма ( $S=1$ ) могут быть записаны в виде

$$\begin{aligned} \chi_{S=1, M_S=1} &= |\uparrow\uparrow\rangle, \\ \chi_{S=1, M_S=0} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle), \\ \chi_{S=1, M_S=-1} &= |\downarrow\downarrow\rangle. \end{aligned}$$

Для синглетного терма ( $S=0$ ) имеем:

$$\chi_{S=0} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\downarrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\rangle).$$

Таким образом, для термов различной мультиплетности запишем:

$$\begin{aligned} \Psi_{S=0} &= \sum_{\alpha} C_{\alpha} \Psi_{\alpha}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \chi_{S=0}(\sigma_1, \sigma_2), \\ \Psi_{S=1} &= \sum_{\alpha', M_S} C'_{\alpha'} \Psi_{\alpha'}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \chi_{S=1, M_S}(\sigma_1, \sigma_2). \end{aligned}$$

Матричный элемент дипольного момента, определяющий вероятность перехода между термами различной мультиплетности как в случае спонтанных, так и в случае вынужденных переходов

$$\bar{d}_{fi} = \sum_{\alpha, \alpha', M_S} C_{\alpha} C'^*_{\alpha' M_S} \langle \Psi_{\alpha'} | \vec{d} | \Psi_{\alpha} \rangle \langle \chi_{S=1, M_S} | \chi_{S=0} \rangle.$$

Так как для любого значения  $M_S$  верно равенство

$$\langle \chi_{S=1, M_S} | \chi_{S=0} \rangle = 0,$$

матричный элемент дипольного момента для таких переходов обращается в ноль. Следовательно, в электрическом дипольном приближении переходы с изменением спина запрещены.

**Примечание.** Следует отметить, что в тяжёлых многоэлектронных атомах правило отбора по спину  $\Delta S = 0$  часто нарушается. Примером такого нарушения может служить линия  $(6s6p)^3P \rightarrow (6s^2)^1S$  атома ртути. Причиной нарушения является тот факт, что правило отбора  $\Delta S = 0$  сформулировано в рамках приближения  $LS$  связи. В тяжёлых атомах приближение  $LS$  связи не вполне удовлетворительно. Это означает, что стационарные состояния электронной оболочки атома лишь приближённо характеризуются определённым значением квантового числа  $S$ , что и ведёт к нарушению запрета интеркомбинаций.

**6.8(78).** Определить вероятность фотоионизации атома водорода в состоянии  $1s$  линейно поляризованным импульсом излучения гауссовой формы  $E = E_0 \exp\left(-\frac{t^2}{2\tau^2}\right) \cos(\omega_0 t)$ . Считать, что  $\omega_0 \tau \gg 1$  и  $\hbar\omega_0 \gg |E_{1s}|$ .

### Решение

Направим ось  $z$  вдоль вектора поляризации электрического поля волны. В силу выполнения условия  $\hbar\omega_0 \gg |E_{1s}|$  конечное состояние электрона в континууме можно аппроксимировать плоской волной де Бройля. Тогда для амплитуды вероятности перехода в состояние континуума с волновым вектором  $\vec{k}$  и энергией  $\varepsilon = \hbar^2 k^2 / 2m$  можно записать

$$C_{\vec{k}1} \approx \frac{id_{\vec{k}1} E_0}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-t^2/2\tau^2\right) \cos(\omega_0 t) \exp(i(\varepsilon + I)t/\hbar) dt.$$

Здесь  $I = -E_{1s}$  — потенциал ионизации атома водорода,

$d_{\vec{k}1} = e \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \exp(i\vec{k}\vec{r}) z \psi_{1s}(r) d^3r$  — матричный элемент оператора

дипольного момента, связывающий начальное  $1s$  состояние и состояние континуума. Вычисляя интеграл по угловым переменным (для этого, например, можно воспользоваться разложением плоской волны по сферическим функциям), получим

$$d_{\vec{k}1} = e \frac{4\pi i \cos\theta_k}{(2\pi)^{3/2}} \cdot I(k),$$



где  $I(k) = \int j_1(kr) \psi_{1s}(r) r^3 dr$ ,  $\theta_k$  – угол вылета по отношению к направлению вектора поляризации электрического поля волны (ось  $Oz$ ), а  $j_1(kr)$  – сферическая функция Бесселя.

Вычисляем интеграл  $I(k)$ . Учитывая, что

$$\psi_{1s}(r) = \exp(-r/a_0) / \sqrt{\pi a_0^3}$$

и

$$j_1(kr) = \frac{\sin(kr)}{(kr)^2} - \frac{\cos(kr)}{kr},$$

имеем

$$I(k) = \frac{2a_0^3}{\sqrt{\pi a_0^3}} \left( \frac{1}{(1+(ka_0)^2)^2} - \frac{1-3(ka_0)^2}{(1+(ka_0)^2)^6} \right).$$

Полная вероятность ионизации может быть вычислена как  $W = \int |C_{\bar{k}1}|^2 d^3k$ , т.е. как интеграл по всем состояниям континуума, куда произошел переход. Интегрируя по углу вылета электрона, получим

$$W = \frac{8}{3} \frac{e^2 E_0^2}{4\hbar^2} \int I^2(k) k^2 dk \int_{-\infty}^{\infty} dt' dt'' \exp(-(t'^2 + t''^2)/2\tau^2) \exp(i(\varepsilon + I)/\hbar - \omega)(t' - t'').$$

Проинтегрируем полученное выражение по энергии с учетом того, что

$$k^2 dk = \frac{\sqrt{2m^3 \varepsilon}}{\hbar^3} d\varepsilon. \text{ Принимая во внимание, что в длинном импульсе}$$

( $\omega\tau \gg 1$ ) переход будет идти в узкий набор состояний вблизи энергии  $\varepsilon^* = \hbar^2(k^*)^2/2m = \hbar\omega - I \approx \hbar\omega$ , в выражении для  $W$  можно пренебречь зависимостью предэкспоненциального члена от энергии. Учитывая, что

$$\int \exp(i(\varepsilon + I)/\hbar - \omega)(t' - t'') d\varepsilon = \hbar \int \exp(i\xi(t' - t'')) d\xi = 2\pi\hbar\delta(t' - t''),$$

получим

$$W \approx \frac{4\pi}{3} \frac{e^2 E_0^2}{\hbar^2} I^2(k^*) \tau \sqrt{2\pi m^3 \varepsilon^*}.$$

Поскольку неравенство  $\hbar\omega_0 \gg |E_{1s}|$  эквивалентно условию  $k^* a_0 \gg 1$ , из выражения для  $I(k^*)$  имеем  $I(k) \sim 1/(ka_0)^4$ . Поэтому

$$W \sim \frac{E_0^2 \tau}{(\hbar\omega)^{7/2}},$$

т.е. в первом порядке теории возмущений вероятность фотоионизации пропорциональна интенсивности излучения, длительности импульса и быстро убывает с увеличением частоты излучения. Более точный расчет, учитывающий влияние кулоновского потенциала на вид волновых функций континуума, показывает, что максимальное значение вероятности фотоионизации достигается на пороге процесса  $\hbar\omega_0 = |E_{1s}|$ .

## Глава 7. Многоэлектронные атомы

1. Состояние электрона в центрально-симметричном потенциале в многоэлектронном атоме определяется четырьмя квантовыми числами:

$n$  – главное квантовое число;

$\ell$  – орбитальное квантовое число;

$m_\ell$  – проекция орбитального момента на выделенное направление;

$m_s$  – проекция спина электрона на выделенное направление;

Вместо последней пары квантовых чисел могут быть введены:

$j$  – квантовое число полного момента импульса электрона,

$m_j$  – проекция полного момента импульса электрона на выделенное направление.

2. **Принцип Паули:** В физической системе, состоящей из многих ферми-частиц, в одном состоянии не может находиться более одного фермиона. Его альтернативная формулировка: Волновая функция системы фермионов должна изменять знак (быть антисимметричной) при перестановке двух фермионов.

3. **Оболочка** – совокупность электронов с одинаковым значением главного квантового числа  $n$ .

4. **Подоболочка** – совокупность электронов с одинаковыми значениями главного и орбитального квантовых чисел  $n$  и  $\ell$ . Электроны одной подоболочки называются **эквивалентными**.

Орбитальный момент электрона обозначается буквой в соответствии со схемой:

Момент	$\ell = 0 \ 1 \ 2 \ 3 \ 4 \ 5 \ 6 \ \dots$
Обозначение состояния	$s \ p \ d \ f \ g \ h \ i \ \dots$

5. **Электронная конфигурация** – распределение электронов по оболочкам и подоболочкам – квантовым числам  $n$  и  $\ell$ .

Обозначение группы из  $k$  электронов с квантовым числом орбитального момента  $\ell$  и главным квантовым числом –  $n\ell^k$ .

где число  $\ell$  обозначается буквой в соответствии с приведенной выше схемой.

6. Число электронов в заполненной подоболочке (число состояний в подоболочке) равно  $2(2\ell + 1)$ .

7. Число электронов в заполненной оболочке (число состояний в оболочке) равно:

$$\sum_{\ell=0}^{n-1} 2(2\ell + 1) = 2n^2.$$

8. Общее правило сложения моментов импульса. Квантовое число суммарного момента импульса  $\vec{J} = \vec{j}_1 + \vec{j}_2$  принимает следующие значения:

$$J = |j_1 - j_2|, |j_1 - j_2| + 1, \dots, j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2.$$

### 9. Типы связей моментов в атоме.

Нормальная,  $LS$ -связь:  $\vec{L} = \sum \vec{\ell}_i$ ,  $\vec{S} = \sum \vec{s}_i$ ;  $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ ,

$jj$ -связь:  $\vec{j}_i = \vec{\ell}_i + \vec{s}_i$ ,  $\vec{J} = \sum \vec{j}_i$ .

Суммирование проводится по всем электронам конфигурации, квантовые числа суммарных моментов находятся по общему правилу. Ниже везде, за исключением специально оговоренных случаев, будем иметь в виду  $LS$ -связь.

10. Заполнение одноэлектронных состояний регламентируется следующим правилом:

а) энергия одноэлектронных состояний  $n\ell$  возрастает вместе с ростом  $(n+\ell)$ ;

б) в группе состояний с одинаковым значением суммы  $n+\ell$  энергия одноэлектронных состояний  $n\ell$  возрастает вместе с ростом  $n$ .

11. В заданной электронной конфигурации квантовые числа  $L$  и  $S$  определяют ее **терм**.

**Обозначение термина:**  $^{2S+1}L$ , где  $L$  – орбитальное квантовое число конфигурации в соответствии со схемой (сравн. с обозначением одноэлектронных состояний):

Момент	$L = 0$	$1$	$2$	$3$	$4$	$5$	$6$	...
Обозначение термина	$S$	$P$	$D$	$F$	$G$	$H$	$I$	...

$2S+1$  – **мультиплетность** термина.

Терм характеризуется также **четностью** конфигурации, которой он принадлежит; она равна  $P = (-1)^{\sum \ell_i}$ ;

алгебраическое суммирование по всем электронам конфигурации.

12. Правила Хунда – правила, позволяющие определить основной терм (терм с наименьшей энергией) в заданной электронной конфигурации:

1) среди термов, принадлежащих к одной конфигурации, наиболее глубоким (имеющим наименьшую энергию) является терм с наибольшим возможным в этой конфигурации значением полного спина  $S$ ;

2) среди термов с одинаковым спином  $S$  наиболее глубоким является терм с наибольшим значением полного орбитального момента  $L$ .

13. Энергии уровней водородоподобных ионов с учетом тонкой структуры

$$E_{nj} = -\frac{Z^2 Ry}{n^2} - \frac{\alpha^2 Z^4 Ry}{n^3} \left( \frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right).$$

Интервал тонкой структуры – разность энергий уровней

$$\Delta E_{n\ell} = E_{n,j=\ell+1/2} - E_{n,j=\ell-1/2} :$$

$$\Delta E_{n\ell} = \frac{\alpha^2 Z^4 Ry}{n^3 \ell(\ell+1)}.$$

В приведенных выше формулах  $\alpha = e^2/\hbar c = 1/137$  – постоянная тонкой структуры.

Для атомов щелочных металлов или электронов, находящихся на внутренних атомных оболочках выражение для интервала тонкой структуры записывают в виде:

$$\Delta E_{n\ell} = \frac{\alpha^2 (Z - a')^4 Ry}{n^3 \ell(\ell+1)},$$

где  $a'$  – константа экранирования для тонкой структуры.

### Задачи

**7.1(79).** В изоэлектронной последовательности гелиеподобных ионов ( $\text{He}, \text{Li}^+, \text{Be}^{2+}, \dots, \text{U}^{90+}$ ) определить заряд ядра  $Z$ , при котором  $LS$ -связь (нормальная связь) сменяется  $jj$ -связью.

### Решение

Для ответа на заданный вопрос, необходимо сравнить характерные энергии электростатического взаимодействия электронов в многоэлектронном атоме друг с другом и спин-орбитального взаимодействия. В зависимости от соотношения между этими двумя величинами будет реализовываться соответствующий тип связи –  $LS$ -связь (если взаимодействие электронов сильнее спин-орбитального) или  $jj$ -связь (в обратном случае). Характерную величину энергии электростатического взаимодействия можно оценить, как (см. задачу 7.2)

$$\Delta E_{ee} \propto ZRy,$$

оценку энергии спин-орбитального взаимодействия можно получить из формулы тонкой структуры (Дирака)

$$\Delta E_{jj} \propto \alpha^2 Z^4 Ry.$$

Как видно, при малых зарядах ядра спин-орбитальное взаимодействие имеет незначительную величину по сравнению с кулоновским отталкиванием электронов, однако его величина быстрее растет с увеличением заряда ядра. В итоге условие на переход к  $jj$ -связи имеет вид:

$$ZRy \ll \alpha^2 Z^4 Ry \Rightarrow \alpha^2 Z^3 \gg 1.$$

Численная оценка дает:  $Z \gg \sqrt[3]{\alpha^{-2}} \approx 27$ .

Отметим, что данная оценка справедлива для двухэлектронной (гелиеподобной) системы. В тяжелых многоэлектронных атомах внешние валентные электроны частично экранированы электронами, находящимися на внутренних оболочках. Это приводит к тому, что в оценочных выражениях для энергии спин-орбитального и кулоновского взаимодействий надо использовать некоторые эффективные заряды, меньшие реального заряда атомного ядра. В результате область применимости приближения  $LS$ -связи в многоэлектронных атомах оказывается значительно больше, чем следует из проведенной нами оценки, а в «чистом» виде приближение  $jj$ -связи в атомах не реализуется никогда.

Другая ситуация реализуется для многозарядных ионов, где степень экранировки внешних электронов оказывается значительно меньше. В таких системах в соответствии с проведенными выше оценками при достаточно больших  $Z$  сложение моментов надо проводить в приближении  $jj$ -связи.

Приближение  $jj$ -связи часто используется также в физике атомного ядра<sup>1</sup>, что обусловлено более важной ролью спин-орбитального взаимодействия внутри атомного ядра.

**7.2(80).** Воспользовавшись теорией возмущений, в рамках приближения  $LS$ -связи построить термы и определить их энергии для следующих конфигураций атома гелия и гелиеподобных ионов:

- а)  $1s^2$ , б)  $1s2s$ , в)  $1s2p$ .

Спин-орбитальное взаимодействие не учитывать.

### Решение

Если не учитывать взаимодействие электронов друг с другом и энергию спин-орбитального взаимодействия в атоме, то энергия любого

<sup>1</sup> В частности, как результат, энергия спин-орбитального взаимодействия в многоэлектронном атоме оказывается пропорциональна квадрату заряда атомного ядра.

состояния гелиеподобного иона будет записываться в виде обычной суммы энергий состояний каждого из электронов:

$$E^{(0)} = -Z^2 Ry \left( \frac{1}{n_1^2} + \frac{1}{n_2^2} \right),$$

где  $n_1$  и  $n_2$  - главные квантовые числа электронов. Отметим, что в этом приближении энергия не зависит от значения орбитальных квантовых чисел электронов.

Для случая а) эта сумма соответствует значению:  $E^{(0)} = -2Z^2 Ry$ .

Волновая функция конфигурации  $1s^2$  будет представлять собой произведение волновых функций отдельных электронов:

$$\Psi^{(0)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_{1s}(\vec{r}_1)\psi_{1s}(\vec{r}_2).$$

Отметим, что полученная функция симметрична относительно перестановки электронов местами. Это означает, что в конфигурации  $1s^2$  спиновая часть волновой функции должна быть антисимметрична относительно перестановки электронов местами, т. е. полный спин двухэлектронной системы может быть равен только нулю. Другими словами в заданной конфигурации реализуется единственный терм  $^1S$ , соответствующий основному состоянию системы.

В приближении  $LS$ -связи энергия электростатического взаимодействия электронов превышает энергию спин-орбитального взаимодействия в атоме. Поэтому при не слишком больших  $Z$  (см. задачу 7.1) для нахождения поправки к энергии основного состояния, мы, прежде всего, должны учесть энергию электростатического взаимодействия электронов друг с другом.

Если мы хотим воспользоваться теорией возмущений, то можно рассмотреть взаимодействие электронов, как возмущение к гамильтониану

$$\hat{H}_0 = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{Ze^2}{r_2},$$

представляющему сумму одноэлектронных гамильтонианов водородоподобных ионов, и для поиска поправки усреднить «оператор возмущения»

$$V_{ee}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

по невозмущенной функции основного состояния.

Здесь следует сделать важную оговорку. Одним из условий использования теории возмущений является малость поправки по сравнению с невозмущенным значением. Фактически, речь идет о малости

энергии электростатического взаимодействия электронов по сравнению с энергией их взаимодействия с атомным ядром. Это условие выполнено для достаточно больших  $Z$ , таких, что приближение  $LS$ -связи остается справедливым. Однако для атома гелия ( $Z = 2$ ) можно ожидать, что точность наших расчетов будет невелика. Особый интерес в этом смысле представляет собой расчет энергии отрицательного иона водорода<sup>2</sup> ( $Z = 1$ ), когда параметр малости для использования теории возмущений просто отсутствует.

Поправка первого порядка равна:

$$E^{(1)} = \left\langle \Psi^{(0)} \left| \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \right| \Psi^{(0)} \right\rangle = \int \frac{e^2}{r_{12}} |\Psi_{1s}(\vec{r}_1)|^2 |\Psi_{1s}(\vec{r}_2)|^2 d\vec{r}_1 d\vec{r}_2.$$

Вычисление этого шестикратного интеграла можно провести следующим образом<sup>3</sup>. Рассмотрим сначала угловую часть. При вычислении интеграла по углам  $(\theta_2, \varphi_2)$  второго электрона направим ось  $z_2$  вдоль вектора  $\vec{r}_1$ . Поэтому

$$\begin{aligned} I_2 &= \int \frac{d\Omega_2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} = 2\pi \int \frac{\sin \theta_2 d\theta_2}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \theta_2}} = 2\pi \int_{-1}^1 \frac{dx}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 x}} = \\ &= -\frac{2\pi}{r_1 r_2} (|r_1 - r_2| - (r_1 + r_2)) = \begin{cases} 4\pi/r_1, & r_1 > r_2 \\ 4\pi/r_2, & r_2 > r_1. \end{cases} \end{aligned}$$

Интегрирование по углам первого электрона  $(\theta_1, \varphi_1)$  сводится теперь к умножению на  $4\pi$ . Наконец, вычисление радиального интеграла

$$\Delta E = \frac{Z^6 e^2}{\pi^2 a_0^6} \int r_1^2 dr_1 r_2^2 dr_2 \exp\left(\frac{-2Z(r_1 + r_2)}{a_0}\right) \cdot 16\pi^2 \begin{cases} 1/r_1, & r_1 > r_2 \\ 1/r_2, & r_2 > r_1 \end{cases}$$

дает 
$$\Delta E_{1s} = \frac{5}{4} ZRy,$$

поэтому энергия основного состояния гелиеподобного иона есть

$$E = -2Z^2 Ry + \frac{5}{4} ZRy = -2Z^2 \left(1 - \frac{5}{8Z}\right) Ry.$$

Для энергии удаления первого электрона (потенциала ионизации) имеем

$$I = -E + Z^2 Ry = Z^2 Ry - \frac{5}{4} ZRy = Z^2 \left(1 - \frac{5}{4Z}\right) Ry.$$

<sup>2</sup> Такая система существует. Экспериментальное значение потенциала ионизации, т. е. энергии отрыва одного из электронов, составляет  $I \approx 0.75$  эВ

<sup>3</sup> Можно также воспользоваться разложением величины  $1/r_{12}$  по сферическим функциям (см. Приложение), а также ортогональностью последних.



В частности, при  $Z = 2$  (атом He)  $I = 1.5Ry \approx 20.4$  эВ,

$$Z = 3 \text{ (ион Li}^+) I = \frac{63}{12} Ry \approx 71.4 \text{ эВ.}$$

Экспериментально измеренные значения равны 24.59 и 75.64 эВ соответственно. Как видно, для атома гелия наш метод обеспечивает двадцатипроцентную точность.

Как мы уже отмечали, особый интерес представляет расчет энергии отрицательного иона водорода ( $Z=1$ ). В этом случае получаем, что  $I = -Ry/4 < 0$ , т. е. в рамках рассматриваемого подхода отрицательный ион водорода существовать не должен. Это означает, для расчета такой системы наш вариант теории возмущений оказывается неудовлетворительным.

Перейдем теперь к случаям б) и в).

В этих случаях удается построить две комбинации функций, соответствующих синглетному и триплетному термам квантовомеханической системы:

$$\Psi_s = \Psi^{(S)}(\vec{r}) \cdot \chi^{(A)}(\vec{s}) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{1s}(\vec{r}_1)\psi_{2s(p)}(\vec{r}_2) + \psi_{1s}(\vec{r}_2)\psi_{2s(p)}(\vec{r}_1)) \cdot \chi^{(A)}(\vec{s}),$$

$$\Psi_t = \Psi^{(A)}(\vec{r}) \cdot \chi^{(S)}(\vec{s}) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{1s}(\vec{r}_1)\psi_{2s(p)}(\vec{r}_2) - \psi_{1s}(\vec{r}_2)\psi_{2s(p)}(\vec{r}_1)) \cdot \chi^{(S)}(\vec{s}).$$

Из приведенных выражений видно, что синглетный терм характеризуется симметричной пространственной частью волновой функции и антисимметричной спиновой, ситуация для триплетного терма прямо противоположна.

Если теперь искать в рамках теории возмущений энергию каждого из термов, то в нулевом приближении невзаимодействующих электронов энергии синглетного и триплетного термов равны между собой и записываются в виде простой суммы энергий одночастичных состояний  $\Psi_{1s}$  и  $\Psi_{2s(p)}$ :

$$E^{(0)} = E_{1s} + E_{2(p)}.$$

Если заряд ядра равен  $Z$ , то соответствующая энергия нулевого приближения равна

$$E^{(0)} = -Z^2 Ry(1 + 1/4) = -\frac{5}{4} Z^2 Ry,$$

при этом энергия связи возбужденного электрона (потенциал ионизации)  $I = Z^2 Ry/4$ .

Найдем поправку к энергии, которая обусловлена электростатическим взаимодействием электронов, в первом порядке теории возмущений. Для этого усредним оператор возмущения по каждой

из записанных волновых функций. Спинные части волновой функции в обоих случаях при этом превратятся в единичный множитель в силу того, что оператор возмущения не зависит от спинов электронов.

$$\begin{aligned} \left( \frac{\delta E_s}{\delta E_t} \right) &= \left\langle \Psi^{(S)} \left| \frac{e^2}{r_{12}} \right| \Psi^{(S)} \right\rangle = \\ &= \frac{1}{2} \int \left( |\psi_{1s}(\vec{r}_1) \psi_{2p}(\vec{r}_2) \pm \psi_{1s}(\vec{r}_2) \psi_{2p}(\vec{r}_1)|^2 \right) \frac{e^2}{r_{12}} d^6 r = C \pm A. \end{aligned}$$

Знак «плюс» в правой части соответствует синглетному терму, а знак «минус» – триплетному. Здесь также были введены обозначения:

$$C = \int |\psi_{1s}(\vec{r}_1)|^2 |\psi_{2s(p)}(\vec{r}_2)|^2 \frac{e^2}{r_{12}} d^6 r$$

и

$$A = \int \psi_{1s}^*(\vec{r}_1) \psi_{2s}^*(\vec{r}_2) \psi_{1s}(\vec{r}_2) \psi_{2s}(\vec{r}_1) \frac{e^2}{r_{12}} d^6 r.$$

Первый интеграл обычно называют кулоновским – можно сказать, что он описывает взаимодействие двух распределенных зарядов с плотностью  $\rho_i(\vec{r}) = -e|\psi_i(\vec{r})|^2$ . Второй интеграл носит название обменного и классической трактовки ему приписать не удастся. Можно сказать, что это тоже часть кулоновской энергии взаимодействия электронов, но обусловленная чисто квантовым эффектом – свойством симметрии волновой функции относительно перестановки электронов местами. Фактически, за счет свойств симметрии волновой функции расстояние между электронами оказывается различным для синглетных и триплетных термов, что и приводит к расщеплению конфигурации на два терма (см. также задачу 7.8).

Можно показать, что оба интеграла имеют положительные значения. Это автоматически означает, что в первом приближении теории возмущений энергии синглетного и триплетного состояний оказываются различными, причем энергия триплетного состояния по величине меньше на  $2A$ . Этот результат понятен с точки зрения здравого смысла: в триплетном состоянии электроны характеризуются одинаковыми спиновыми состояниями, а это означает, что в соответствии с принципом Паули, они должны в этом случае быть «дальше друг от друга» в классическом фазовом пространстве (занимать в нем различные состояния). Т. е. речь идет о том, что в случае триплетного состояния пары электронов среднее расстояние между ними должно быть больше, что в свою очередь влечет за собой ослабление межэлектронного взаимодействия.

Для нахождения кулоновского и обменного интегралов воспользуемся общим методом, основанным на разложении величины обратного расстояния по сферическим функциям

$$\frac{1}{r_{12}} = \begin{cases} \frac{4\pi}{r_1} \sum_{\ell m} \frac{1}{2\ell+1} \left(\frac{r_2}{r_1}\right)^\ell Y_{\ell m}^*(\theta_1, \varphi_1) Y_{\ell m}(\theta_2, \varphi_2), & r_1 > r_2, \\ \frac{4\pi}{r_2} \sum_{\ell m} \frac{1}{2\ell+1} \left(\frac{r_1}{r_2}\right)^\ell Y_{\ell m}^*(\theta_1, \varphi_1) Y_{\ell m}(\theta_2, \varphi_2), & r_1 < r_2, \end{cases}$$

где  $(\theta_1, \varphi_1)$  и  $(\theta_2, \varphi_2)$  – угловые координаты первого и второго электронов.

Применение этого разложения позволяет в явном виде вычислить каждый из интегралов. Действительно, используя разложение для вычисления кулоновского и обменного интегралов в конфигурации  $1s2s$ , замечаем, что любое слагаемое за исключением нулевого, будучи проинтегрировано по угловым координатам электрона, находящегося в  $s$ -состоянии, даст нулевой вклад в интеграл. С учетом свойства ортонормированности сферических функций угловые интегралы легко вычисляются, и мы получаем следующие выражения для кулоновского и обменного интегралов:

$$C_{1s2s} = \frac{Ze^2}{a_0} \int_0^\infty R_{1s}^2(\xi) \xi d\xi \int_0^\xi R_{2s}^2(\eta) \eta^2 d\eta + \frac{Ze^2}{a_0} \int_0^\infty R_{1s}^2(\xi) \xi^2 d\xi \int_\xi^\infty R_{2s}^2(\eta) \eta d\eta,$$

$$A_{1s2s} = \frac{Ze^2}{a_0} \int_0^\infty R_{1s}(\xi) R_{2s}(\xi) \xi d\xi \int_0^\xi R_{1s}(\eta) R_{2s}(\eta) \eta^2 d\eta +$$

$$+ \frac{Ze^2}{a_0} \int_0^\infty R_{1s}(\xi) R_{2s}(\xi) \xi^2 d\xi \int_\xi^\infty R_{1s}(\eta) R_{2s}(\eta) \eta d\eta.$$

Здесь  $R_{1s}(\xi) = 2 \exp(-\xi)$  и  $R_{2s}(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 - \frac{1}{2} \xi\right) \exp(-\xi/2)$  – безразмерные радиальные части волновых функций соответствующих состояний атомов водорода.

Вычисляя значение каждого из интегралов, имеем:

$$C_{1s2s} = \frac{34}{81} ZRy \approx 11.42 \text{ эВ} \quad \text{и} \quad A_{1s2s} = \frac{32}{729} ZRy \approx 1.19 \text{ эВ}.$$

В случае  $Z=2$  это приводит к следующим значениям энергии термов  $1s2s \ ^1S$  и  $1s2s \ ^3S$ :

$$\text{энергия триплета} \quad -\frac{3097}{729} Ry \approx -4.248 Ry \approx -57.80 \text{ эВ},$$

$$\text{энергия синглета} \quad -\frac{2969}{729} Ry \approx -4.073 Ry \approx -55.41 \text{ эВ},$$

$$\text{величина расщепления} \quad \frac{64}{729} Ry \approx 2.39 \text{ эВ}.$$

Учитывая, что энергия связи второго электрона равна  $4Ry \approx 54.42$  эВ, получаем потенциал ионизации термина  ${}^3S$   $0.248Ry \approx 3.38$  эВ, а термина  ${}^1S$  –  $0.073Ry \approx 0.99$  эВ.

Экспериментальные значения вышеуказанных потенциалов ионизации – 4.77 и 3.98 эВ соответственно.

Такое соотношение между расчетными и экспериментальными данными не может считаться удовлетворительным. Физическая причина отсутствия удовлетворительного согласия заключается в следующем. В отличие от основного состояния водородоподобного иона, отделенного большим энергетическим интервалом от возбужденных состояний, энергии конфигураций невозмущенных конфигураций  $1snl$  близки между собой. Как следствие, для расчета поправок на кулоновскую энергию межэлектронного взаимодействия первого порядка теории возмущений оказывается недостаточно. Можно также сказать, что в рассматриваемом случае межэлектронное взаимодействие сильно искажает (перестраивает) волновые функции атомных электронов, неучет этого искажения и приводит к ошибке в расчетах.

Аналогичные расчеты для конфигурации  $1s2p$  – случай в) – дает еще более неудовлетворительные значения энергий. Вычисляя в этом случае интегралы по угловым переменным аналогичным образом, получим следующие выражения для кулоновского и обменного интегралов:

$$C_{1s2p} = \frac{Ze^2}{a_0} \int_0^\infty R_{1s}^2(\xi) \xi d\xi \int_0^\xi R_{2p}^2(\eta) \eta^2 d\eta + \frac{Ze^2}{a_0} \int_0^\infty R_{1s}^2(\xi) \xi^2 d\xi \int_\xi^\infty R_{2p}^2(\eta) \eta d\eta,$$

$$A_{1s2p} = \frac{Ze^2}{3a_0} \int_0^\infty R_{1s}(\xi) R_{2p}(\xi) d\xi \int_0^\xi R_{1s}(\eta) R_{2p}(\eta) \eta^3 d\eta + \\ + \frac{Ze^2}{3a_0} \int_0^\infty R_{1s}(\xi) R_{2p}(\xi) \xi^3 d\xi \int_\xi^\infty R_{1s}(\eta) R_{2p}(\eta) d\eta.$$

Здесь  $R_{2p}(\xi) = \frac{1}{2\sqrt{6}} \xi \exp(-\xi/2)$  радиальная волновая функция

$2p$ -состояния. Вычисляя значение каждого из интегралов, имеем:

$$C = \frac{118}{243} ZRy \text{ и } A = \frac{224}{6561} ZRy.$$

В случае  $Z = 2$  это приводит к следующим значениям энергии термов  $1s2p \ ^1P$  и  $1s2p \ ^3P$ :

$$\text{энергия триплета} \quad -4.097Ry \approx -55.74 \text{ эВ},$$

$$\text{энергия синглета} \quad -3.961Ry \approx -53.89 \text{ эВ},$$

$$\text{величина расщепления} \quad 0.1366Ry \approx 1.86 \text{ эВ}.$$

Полученный результат является абсолютно неудовлетворительным: поскольку энергия связи электрона в водородоподобном ионе He равна  $4Ry$ , мы получили, что синглетного терма  $^1P$  в конфигурации  $1s2p$  не существует. Как уже отмечалось, наша неудача обусловлена тем, что фактически в рассматриваемой ситуации задача не может быть решена в низшем порядке теории возмущений.

В общем случае можно построить более эффективный вариант теории возмущений. Такой вариант может быть основан, например, на специальном выборе разбиения полного гамильтониана двухэлектронной системы на невозмущенную часть и оператор возмущения. Например, заранее имея представление о том, что каждый из электронов частично экранирует ядро от другого электрона, можно было бы ввести параметр экранировки, выбрать «экранированный» гамильтониан в качестве невозмущенного, а все остальное объявить поправкой-возмущением. В такой постановке параметр степени экранировки можно было бы использовать для минимизации получившегося значения поправки первого порядка, т. е. в некотором смысле для поиска самого удачного разбиения гамильтониана на основную часть и возмущение для данного класса невозмущенных гамильтонианов.

Отметим, что параметр экранирования может быть выбран различным для каждого из электронов. Например, для одного из электронов он может быть выбран близким к нулю (такой электрон естественно назвать внутренним), а для другого (внешнего электрона) – близким к единице. Оказывается, именно такое строение основного состояния системы с «вытолкнутым» электроном оказывается энергетически выгодным для заряда ядра  $Z = 1$ , т. е. для отрицательного иона водорода, в то время как в случае  $Z \geq 2$  энергетически более выгодными оказываются состояния с одинаковым коэффициентом экранирования для каждого из электронов.

**7.3(81).** В рамках теории возмущений оценить потенциалы ионизации атома He и гелиеподобного иона урана  $U^{90+}$ .

### Решение

Для решения воспользуемся результатами двух предыдущих задач. В случае атома гелия электростатическое взаимодействие многократно превышает энергию спин-орбитального взаимодействия в атоме. Поэтому можно воспользоваться результатом, полученным в задаче 7.2: потенциал ионизации атома гелия

$$I = Z^2 \left( 1 - \frac{5}{4Z} \right) Ry = 1.5 Ry \approx 20.4 \text{ эВ.}$$

Другая ситуация реализуется для гелиеподобного иона урана ( $Z = 92$ ). В этом случае в системе реализуется  $jj$ -связь, а электростатическое взаимодействие много меньше спин-орбитального. Поэтому, пренебрегая электростатическим взаимодействием электронов, мы в первом приближении должны учесть поправку к энергии системы, обусловленную спин-орбитальным взаимодействием. В рамках теории Дирака поправка к энергии каждого из электронов есть

$$\Delta E_{nj} = \frac{\alpha^2 Z^2}{n} \cdot E_n \cdot \left( \frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right),$$

где  $E_n = -Z^2 Ry/n^2$  – уровни энергии в нулевом приближении,  $\alpha$  – постоянная тонкой структуры,  $j$  – квантовое число полного момента количества движения. Для электрона в состоянии  $1s$  имеем:

$$I = Z^2 Ry + \frac{\alpha^2 Z^4}{4} Ry = \left( 1 + \alpha^2 Z^2/4 \right) Z^2 Ry \approx 1.1 Z^2 Ry \approx 130 \text{ кэВ.}$$

В нашем приближении (отсутствие электростатического взаимодействия между электронами) энергии отрыва первого и второго электрона оказываются одинаковыми.

**7.4(82).** В приближении самосогласованного поля Хартри каждый из электронов в атоме движется в электростатическом поле, создаваемом ядром с зарядом  $Z$  и совокупностью  $Z-1$  электронов. Считая, что

плотность заряда, создаваемая в пространстве электроном есть  $-e|\psi(\vec{r},t)|^2$ , получить уравнение для волновой функции, описывающей состояние электрона в основном состоянии атома гелия.

### Решение

Электростатический потенциал, создаваемый каждым из электронов в атоме гелия,

$$\varphi_e(\vec{r}) = \int \frac{\rho(\vec{r}_1)}{|\vec{r} - \vec{r}_1|} d^3r_1,$$

где  $\rho(\vec{r}) = -e|\psi_g(\vec{r})|^2$  – плотность заряда, создаваемая в пространстве каждым из электронов. Поэтому самосогласованный потенциал, в котором движется каждый их электронов, имеет вид

$$V_{eff}(\vec{r}) = -\frac{Ze^2}{r} - e\varphi_e(\vec{r}),$$

а уравнения самосогласованного поля записываются в виде

$$(\hat{T} + V_{eff}(\vec{r}))\psi_g = E_g\psi_g.$$

Такое же уравнение справедливо и для второго электрона.

Предположим, что распределение заряда  $\rho(r)$  является сферически симметричным. Тогда выражение для эффективного потенциала можно переписать в виде

$$V_{eff}(\vec{r}) = -\frac{Ze^2}{r} + e^2 \int r_1^2 R_g^2(r_1) dr_1 \int \frac{d\Omega_1}{|\vec{r} - \vec{r}_1|},$$

где  $R_g$  – радиальная волновая функция электрона в атоме гелия,  $d\Omega_1$  – элемент телесного угла, соответствующего координате  $\vec{r}_1$ . Выполняя интегрирование по угловым координатам, аналогично тому, как это было сделано в задаче 7.2, получим

$$V_{eff}(r) = -\frac{Ze^2}{r} + \delta V(r),$$

где  $\delta V = 4\pi e^2 \int r_1^2 R_g^2(r_1) dr_1 \cdot \begin{cases} 1/r & r_1 < r \\ 1/r_1 & r_1 > r \end{cases}$  – поправка к кулоновскому

потенциалу, обусловленная взаимодействием электронов друг с другом.

Как видно, самосогласованный потенциал обладает центральной симметрией, поэтому стационарные состояния каждого из электронов

характеризуются определенным значением орбитального момента. Ниже других по энергии лежит  $s$ -состояние, поэтому уравнение Хартри для основного состояния атома гелия можно переписать в виде

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{1}{r} \frac{d^2 r R_g(r)}{dr^2} + V_{\text{eff}}(r, R_g(r)) R_g(r) = E_g R_g(r).$$

Полученное интегро-дифференциальное уравнение не имеет аналитического решения и должно решаться численно.

Полная волновая функция основного состояния атома гелия в нашем приближении имеет вид

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = R_g(r_1) R_g(r_2),$$

она является симметричной относительно перестановки электронов местами, а следовательно, задает синглетный терм  $^1S$  в электронной конфигурации  $1s^2$ . Энергия этого состояния

$$E = 2E_g - \langle R_g | \delta V | R_g \rangle,$$

последнее слагаемое в выражении возникает вследствие того факта, что энергия межэлектронного взаимодействия относится сразу к обоим электронам и не должна учитываться дважды.

**7.5(83).** Найти энергию и волновую функцию основного состояния системы из двух связанных линейных осцилляторов, описываемую гамильтонианом

$$\hat{H} = \hat{H}_1(x_1) + \hat{H}_2(x_2) + \alpha x_1 x_2 \quad (\text{здесь}$$

$\hat{H}_i = \hat{T}_i + m\omega_0^2 x_i^2 / 2$ ,  $i = 1, 2$  – гамильтониан одномерного гармонического осциллятора), в приближении самосогласованного поля Хартри. Результат сравнить с точным решением (см. задачу 3.23).

### Решение

Запишем уравнения Хартри для одночастичных волновых функций для этого случая. Очевидно, что в основном состоянии уравнения для волновых функций двух частиц совпадут, так как гамильтониан симметричен относительно замены  $1 \leftrightarrow 2$ . Основное состояние будет описываться волновой функцией  $\Psi_g(x_1, x_2) = \psi_g(x_1)\psi_g(x_2)$ . Уравнение Хартри примет вид:

$$\left[ \hat{H}_1(x_1) + \int \alpha x_1 x_2 |\psi_g(x_2)|^2 dx_2 \right] \psi_g(x_1) = E_1 \psi_g(x_1).$$

За счет того, что одночастичная волновая функция основного состояния четна, мы видим, что интегральное слагаемое в этом уравнении равно



нулю. Таким образом, в подходе Хартри, задача ничем не отличается от двух независимых осцилляторов. Энергия и волновая функция основного состояния поэтому равны соответственно:

$$E_g = (\hbar\omega_0 + \hbar\omega_0)/2 = \hbar\omega_0$$

и

$$\Psi_g(x_1, x_2) = \Psi_0(x_1)\Psi_0(x_2).$$

Здесь  $\Psi_0(x_i) = \sqrt{\frac{m_i\omega_0}{\pi\hbar}} \exp\left(-\frac{m_i\omega_0 x_i^2}{2\hbar}\right)$  – волновая функция основного

состояния гармонического осциллятора.

Мы видим, что в рамках метода Хартри энергия основного состояния энергии связанных осцилляторов не отличается от энергии невзаимодействующих осцилляторов. Такой же результат получается и в первом порядке теории возмущений (задача 3.26). Для расчета поправки к уровню энергии необходимо использовать второй порядок теории возмущений. В результате в рассматриваемом случае теория возмущений оказывается более эффективным способом анализа системы, чем приближение самосогласованного поля Хартри. Так получилось потому, что приближение Хартри дает наилучший результат на классе волновых функций, представимых в виде произведения одночастичных функций. Однако уже во втором порядке теории возмущений для расчета поправки к энергии состояния используется волновая функция, которая не может быть факторизована на одноэлектронные функции каждой из частиц. Таким образом, в этой задаче очень ярко проявляется важность невозможности факторизации волновой функции.

**7.6(84).** Определить возможные термы и состояния, принадлежащие электронным конфигурациям  $np, n'p$  и  $np^2$ , в приближении  $LS$ - и  $jj$ -связей.

### Решение

Начнем с двух неэквивалентных электронов  $np, n'p$ . Так как главные квантовые числа у них по определению различны, то принцип Паули не накладывает никаких дополнительных ограничений на совпадение остальных квантовых чисел.

В приближении  $LS$ -связи получаем, что квантовое число суммарного орбитального момента может принимать значения  $L=0, 1, 2$ , а суммарный спиновый момент пары электронов  $S=0, 1$ . При этом

возможны любые комбинации этих двух квантовых чисел. С учетом  $\bar{J} = \bar{L} + \bar{S}$  получаем набор из шести возможных термов

$${}^1S, {}^1P, {}^1D, {}^3S, {}^3P, {}^3D$$

и соответствующих им десяти состояний

$${}^1S_0, {}^1P_1, {}^1D_2, {}^3S_1, {}^3P_{0,1,2}, {}^3D_{1,2,3}.$$

Как видно, понятие термина и состояния для синглетов оказываются тождественными. Триплетный терм  ${}^3S$  также состоит из единственного состояния.

В приближении  $jj$ -связи каждый из электронов может обладать одним из двух значений квантового числа полного механического момента:  $j_p = \{1/2, 3/2\}$ . При этом точно так же возможны любые комбинации моментов отдельных электронов. Определить терм в этом случае значит задать значения квантовых чисел  $j$  всех электронов конфигурации. Очевидно, для конфигурации двух неэквивалентных  $p$ -электронов возможны следующие термы

$$\{1/2, 1/2\}, \{1/2, 3/2\}, \{3/2, 1/2\}, \{3/2, 3/2\}.$$

Возможные состояния записываются здесь следующим образом: в фигурных скобках указываются квантовые числа  $j$  отдельных электронов, а за скобками – возможные значения  $J$ . В результате получаем следующий набор состояний:

$$\{1/2, 1/2\}_{0,1}, \{1/2, 3/2\}_{1,2}, \{3/2, 1/2\}_{1,2}, \{3/2, 3/2\}_{0,1,2,3}.$$

Как видно, общее число состояний (размерность базиса пространства) также равно десяти и не зависит от типа связи.

Случай эквивалентных  $p$ -электронов чуть более сложный: для эквивалентных электронов не могут одновременно совпадать квантовые числа  $m_\ell$  и  $m_s$ . Одним из самых простых и наглядных способов поиска разрешенных термов в приближении  $LS$ -связи является перечисление всех возможных значений проекций  $M_L$  и  $M_S$ . Для этого мы составим таблицу, в которую внесем все возможные положительные значения квантовых чисел  $M_L$  и  $M_S$ <sup>4</sup>. При составлении таблицы не стоит забывать о принципе неразличимости электронов, т.е. о том, что электроны в данной таблице пронумерованы условно. Утверждение вида  $(m_\ell)^{(1)} = 1$ ,  $(m_\ell)^{(2)} = 0$  правильнее будет выражать так: «Один из  $p$ -электронов

<sup>4</sup> Для отрицательных значений получится точно такой же набор значений. Поэтому мы их отдельно выписывать не будем.

характеризуется единичной проекцией орбитального момента на ось квантования, а второй – нулевой».

В итоге мы получаем набор всех возможных значений проекций  $M_L$  и  $M_S$ , которые однозначно задают возможные в данной конфигурации термы. Для того чтобы понять, какие значения могут принимать квантовые числа  $L$  и  $S$ , лучше всего начать с максимально возможных проекций. Так, наличие проекций  $M_L = 1$  и  $M_S = 1$  указывает на то, что для пары эквивалентных  $p$ -электронов реализуется терм  ${}^3P$ , к нему же должны относиться еще три состояния с другими проекциями:  $M_L = 1, M_S = 0$ ;  $M_L = 0, M_S = 1$  и  $M_L = 0, M_S = 0$ . Из оставшихся в таблице максимальная пара проекций – это  $M_L = 2, M_S = 0$ , что является указанием на терм  ${}^1D$ . После учета остальных значений проекции момента данного терма остается единственная графа в таблице  $M_L = 0, M_S = 0$ , что соответствует терму  ${}^1S$ . В итоге получаем все возможные состояния для конфигурации  $np^2$ :  ${}^1S_0, {}^1D_2, {}^3P_{0,1,2}$ .

$m_\ell^{(1)}$	$m_\ell^{(2)}$	$m_s^{(1)}$	$m_s^{(2)}$	Подоболочка (схематично)	$M_L$	$M_S$			
1	0	1/2	1/2	<table border="1" style="display: inline-table; vertical-align: middle;"><tr><td style="width: 20px; height: 20px;"></td><td style="width: 20px; height: 20px; text-align: center;">↑</td><td style="width: 20px; height: 20px; text-align: center;">↑</td></tr></table>		↑	↑	1	1
	↑	↑							
1	-1	1/2	1/2	<table border="1" style="display: inline-table; vertical-align: middle;"><tr><td style="width: 20px; height: 20px; text-align: center;">↑</td><td style="width: 20px; height: 20px;"></td><td style="width: 20px; height: 20px; text-align: center;">↑</td></tr></table>	↑		↑	0	1
↑		↑							
1	1	1/2	-1/2	<table border="1" style="display: inline-table; vertical-align: middle;"><tr><td style="width: 20px; height: 20px;"></td><td style="width: 20px; height: 20px;"></td><td style="width: 20px; height: 20px; text-align: center;">↑↓</td></tr></table>			↑↓	2	0
		↑↓							
1	0	1/2	-1/2	<table border="1" style="display: inline-table; vertical-align: middle;"><tr><td style="width: 20px; height: 20px;"></td><td style="width: 20px; height: 20px; text-align: center;">↓</td><td style="width: 20px; height: 20px; text-align: center;">↑</td></tr></table>		↓	↑	1	0
	↓	↑							
1	0	-1/2	1/2	<table border="1" style="display: inline-table; vertical-align: middle;"><tr><td style="width: 20px; height: 20px;"></td><td style="width: 20px; height: 20px; text-align: center;">↑</td><td style="width: 20px; height: 20px; text-align: center;">↓</td></tr></table>		↑	↓	1	0
	↑	↓							
1	-1	1/2	-1/2	<table border="1" style="display: inline-table; vertical-align: middle;"><tr><td style="width: 20px; height: 20px; text-align: center;">↓</td><td style="width: 20px; height: 20px;"></td><td style="width: 20px; height: 20px; text-align: center;">↑</td></tr></table>	↓		↑	0	0
↓		↑							
1	-1	-1/2	1/2	<table border="1" style="display: inline-table; vertical-align: middle;"><tr><td style="width: 20px; height: 20px; text-align: center;">↑</td><td style="width: 20px; height: 20px;"></td><td style="width: 20px; height: 20px; text-align: center;">↓</td></tr></table>	↑		↓	0	0
↑		↓							
0	0	1/2	-1/2	<table border="1" style="display: inline-table; vertical-align: middle;"><tr><td style="width: 20px; height: 20px;"></td><td style="width: 20px; height: 20px; text-align: center;">↑↓</td><td style="width: 20px; height: 20px;"></td></tr></table>		↑↓		0	0
	↑↓								

В качестве важного замечания здесь стоит отметить, что волновые функции указанных состояний не будут в точности соответствовать единственным клеточкам таблицы, а будут представлять собой их линейные комбинации.

Перейдем к случаю  $jj$ -связи. В этом случае должны быть различны либо  $j$  электронов, либо их проекции. Различные  $j$ , как и в случае неэквивалентных электронов дают состояния  $\{1/2, 3/2\}_{1,2}$ .

При  $j_1 = j_2 = 1/2$  остается единственная возможность:  $J = 0$  за счет того, что проекции должны быть различны.

Аналогично, в оставшемся случае  $j_1 = j_2 = 3/2$  реализуются только случаи  $J = 0, 2$  (что можно получить, подобным образом составив таблицу возможных значений  $M_J$ ). В итоге для эквивалентных  $p$ -электронов в приближении  $jj$ -связи оказываются возможными следующие состояния:  $\{1/2, 1/2\}_0, \{1/2, 3/2\}_{1,2}, \{3/2, 3/2\}_{0,2}$ .

Отметим, что и в этом случае общее число состояний, равное пяти, не зависит от типа связи.

**7.7(85).** В приближении  $LS$ -связи определить термы, принадлежащие конфигурации  $np^3$ .

### Решение

Решать эту задачу также удобно с помощью таблицы с перечислением всех возможных положительных значений проекций  $M_L$  и  $M_S$ , как это было проделано в задаче 7.6 для двух эквивалентных  $p$ -электронов. Для этого мы составим таблицу, в которую внесем только неотрицательные значения  $M_L$  и  $M_S$ , чего в силу симметрии будет вполне достаточно.

$m_\ell^{(1)}$	$m_\ell^{(2)}$	$m_\ell^{(3)}$	$m_s^{(1)}$	$m_s^{(2)}$	$m_s^{(3)}$	Подоболочка (схематично)	$M_L$	$M_S$
1	0	-1	1/2	1/2	1/2	$\begin{array}{ c c c } \hline \uparrow & \uparrow & \uparrow \\ \hline \end{array}$	0	3/2
1	0	1	1/2	1/2	-1/2	$\begin{array}{ c c c } \hline & \uparrow & \uparrow\downarrow \\ \hline \end{array}$	2	1/2
1	-1	1	1/2	1/2	-1/2	$\begin{array}{ c c c } \hline \uparrow & & \uparrow\downarrow \\ \hline \end{array}$	1	1/2
1	0	0	1/2	1/2	-1/2	$\begin{array}{ c c c } \hline & \uparrow\downarrow & \uparrow \\ \hline \end{array}$	1	1/2
1	0	-1	1/2	1/2	-1/2	$\begin{array}{ c c c } \hline \downarrow & \uparrow & \uparrow \\ \hline \end{array}$	0	1/2
1	-1	0	1/2	1/2	-1/2	$\begin{array}{ c c c } \hline \uparrow & \downarrow & \uparrow \\ \hline \end{array}$	0	1/2
-1	0	1	1/2	1/2	-1/2	$\begin{array}{ c c c } \hline \uparrow & \uparrow & \downarrow \\ \hline \end{array}$	0	1/2

В результате варианты  $M_L = 0, M_S = 3/2$  и  $M_L = 0, M_S = 1/2$  указывают на наличие в данной конфигурации терма  $^4S$ . Оставшиеся же проекции однозначно отвечают термам  $^2D$  и  $^2P$ .

**7.8(86).** Два невзаимодействующих электрона находятся в бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме в состояниях  $n_1 = 1$  и  $n_2 = 2$ . Определить среднее значение квадрата расстояния между ними в случае, если полный спин системы  $S = 0$  и  $S = 1$ . Найти для этих случаев пространственное распределение плотности электрического заряда.

### Решение

В первую очередь построим пространственные части волновых функций для рассматриваемого двухчастичного состояния. Двухэлектронные волновые функции, обладающие определенной симметрией относительно перестановки электронов, имеют вид:

$$\Psi_{\pm}(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(x_1)\psi_2(x_2) \pm \psi_1(x_2)\psi_2(x_1)],$$

где, если выбрать за начало координат центр прямоугольной ямы, волновые функции указанных стационарных состояний

$$\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{\pi x}{a}, \quad \psi_2(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{2\pi x}{a}.$$

Знак «+» в выражении для

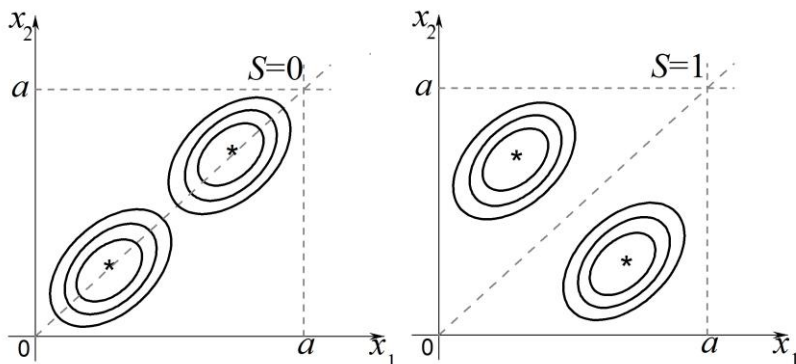
$\Psi_{\pm}(x_1, x_2)$  соответствует синглетному состоянию ( $S = 0$ ), а знак «-» – триплетному ( $S = 1$ ). Места наиболее вероятного расположения

электронов определяются максимумом функции  $|\Psi_{\pm}(x_1, x_2)|^2$ . Эти максимумы находятся вблизи точек:

$$x_1 = x_2 \approx \pm a/4 \text{ для случая } S = 0 \text{ и}$$

$$x_1 \approx a/4, x_2 \approx -a/4 \text{ и } x_1 \approx -a/4, x_2 \approx a/4 \text{ для случая } S = 1.$$

Линии равной плотности вероятности  $|\Psi_{\pm}(x_1, x_2)|^2$  схематично приведены на рисунке.



Средний квадрат расстояния между электронами определим, вычислив его среднее по волновой функции:

$$\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle = \int |\psi_{\pm}(x_1, x_2)|^2 (x_1 - x_2)^2 dx_1 dx_2 = \langle x^2 \rangle_1 + \langle x^2 \rangle_2 \mp 2 \langle x \rangle_{12}^2,$$

где

$$\langle x^2 \rangle_1 = \int \psi_1^2(x) x^2 dx = \frac{a^2}{12} \left(1 - 6/\pi^2\right),$$

$$\langle x^2 \rangle_2 = \int \psi_2^2(x) x^2 dx = \frac{a^2}{12} \left(1 - 3/2\pi^2\right), \quad \langle x \rangle_{12} = \int \psi_1(x) \psi_2(x) x dx = \frac{16a}{9\pi^2}.$$

В результате получим:

$$\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle = \frac{a^2}{6} \left(1 - \frac{15}{4\pi^2} \mp \frac{1024}{27\pi^4}\right) \approx \begin{cases} 0.038a^2, & S = 0, \\ 0.168a^2, & S = 1. \end{cases}$$

Полученный результат очень хорошо иллюстрирует один из ключевых моментов теории тождественных частиц. Даже в отсутствие взаимодействия между электронами среднее расстояние между ними все равно оказывается зависимым от полного спина электронной пары. Это чисто симметричный эффект, не поддающийся классическому толкованию: в синглетном состоянии электроны оказываются ближе друг к другу, чем в триплетном. В итоге, если попытаться учесть кулоновское отталкивание в энергии двухэлектронного состояния (например, по теории возмущений), мы получим результат очень похожий на выводы предыдущих задач: энергия кулоновского взаимодействия электронов в синглетном состоянии оказывается больше, чем в триплетном, т. е. триплетное состояние лежит ниже по энергии, чем синглетное.

Для того, чтобы получить пространственное распределение плотности заряда, необходимо проинтегрировать плотность вероятности по одной из электронных координат:

$$\rho(x) = e \int |\Psi_{\pm}(x_1, x_2)|^2 dx_2 = \frac{e}{2} (|\Psi_1(x)|^2 + |\Psi_2(x)|^2).$$

Несмотря на различие в относительном удалении электронов друг от друга, распределения плотности заряда в синглетном и триплетном состояниях одинаковы.

**7.9(87).** Сверхтонкая структура основного состояния атома, имеющего конфигурацию  $p^4$ , состоит из трех компонент. Определить спин ядра.

### Решение

Сверхтонкое расщепление возникает в результате взаимодействия магнитного момента электронной оболочки атома и магнитного момента атомного ядра. Его оператор записывается в виде

$$\hat{V} = B(\vec{J}\vec{I}),$$

где  $\vec{J}$  и  $\vec{I}$  – операторы полного механического момента электронной оболочки атома и спина ядра,  $B$  – константа связи. Поэтому число компонент сверхтонкой структуры атомных состояний определяется числом возможных ориентаций относительно друг друга векторов полного механического момента электронной оболочки атома  $\vec{J}$  и спина ядра  $\vec{I}$ , т. е. числом возможных значений квантового числа полного механического момента атома  $\vec{F} = \vec{J} + \vec{I}$ .

Определим, прежде всего, основное состояние атома в конфигурации  $p^4$ . Исходя из правил Хунда, находим, что основной терм для данной конфигурации – это  ${}^3P$ , а так как единственная незаполненная подоболочка заполнена больше, чем на половину, то основным состоянием этого атома будет  ${}^3P_2$  (т. н. обращенный мультиплет).

Число возможных значений полного механического момента атома равно  $2 \min(I, J) + 1$ , где  $I$  – квантовое число спина ядра. Так как  $J = 2$ , а компонент сверхтонкой структуры всего три, приходится заключить, что квантовое число, характеризующее спин ядра:  $I = 1$ .

На примере данной задачи обратим внимание на один из возможных методов исследования структуры атомного ядра методами атомной спектроскопии. Действительно, спин атомного ядра – одна из ядерных характеристик, которая, в принципе, может быть рассчитана методами ядерной физики. Ее экспериментальное измерение методами атомной спектроскопии позволяет проверить справедливость конкретных моделей

строения атомного ядра. Отметим, что по характеру сверхтонкого расщепления спин ядра можно определить не всегда: необходимо, чтобы было выполнено условие  $I < J$ .

**7.10(88).** Спин ядра атома  $^{27}\text{Al}$  равен  $I = 5/2$ . Определить количество компонент сверхтонкой структуры в основном состоянии.

### Решение

Эту задачу можно назвать «обратной» задаче 7.9. Для начала необходимо определить основное состояние атома алюминия. Для этого запишем его конфигурацию:  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p$ . Единственной незаполненной подоболочкой является  $3p$ -подоболочка с одним электроном. Основной терм в такой конфигурации  $^2P$ , а основное состояние в соответствии с правилом интервалов Ланде – это состояние  $^2P_{1/2}$ . В данном случае  $J$  основного состояния меньше спина ядра, поэтому именно оно будет определять количество компонент сверхтонкой структуры, которое в данном случае составляет  $2 \min(I, J) + 1 = 2$ .

**7.11(89).** Пучок невозбужденных атомов Na, движущихся в направлении оси  $x$ , пролетает через последовательность трёх приборов Штерна–Герлаха, градиент магнитного поля в которых направлен

- вдоль  $z$ , вдоль  $y$ , вдоль  $z$ ;
- вдоль  $z$ , вдоль  $y$ , вдоль  $y$ ,
- вдоль  $z$ , вдоль  $y$ , вдоль оси  $z'$ , направленной под углом  $\pi/4$  к оси  $z$  в плоскости  $zy$ .

Определить число компонент, на которые будет расщеплен пучок в этих случаях.

### Решение

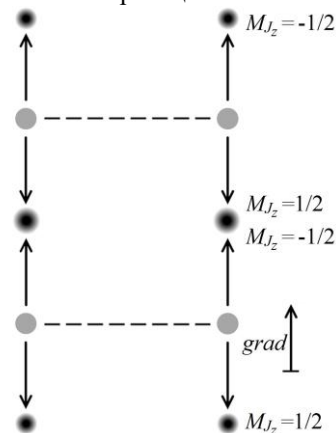
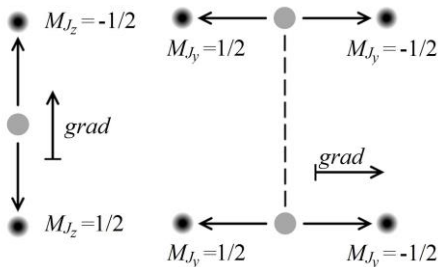
Атомы Na в невозбуждённом состоянии характеризуются конфигурацией  $1s^2 2s^2 2p^6 3s$ , т. е. основным состоянием является  $^2S_{1/2}$ . В этом состоянии магнитный момент является чисто спиновым, а фактор Ланде равен  $g(^2S_{1/2}) = 2$ .

Рассмотрим теперь поочередно случаи а), б) и в).



а) При пролете через первый прибор пучок расщепится на  $2J + 1 = 2$  компоненты по числу возможных значений проекции полного механического момента на ось  $Oz$ .

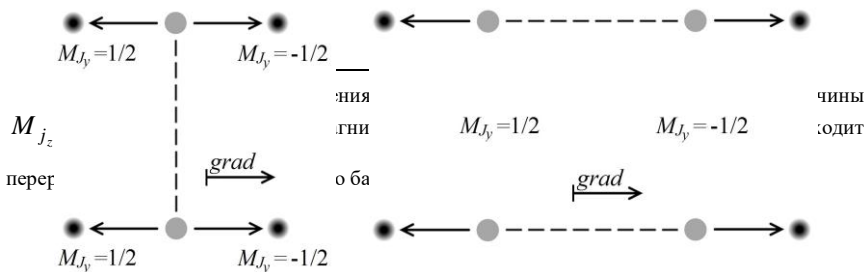
Как нам известно, операторы проекций механического момента не



коммутируют между собой, т. е. в состоянии с одной точно определённой проекцией, значения других проекций точно не определены, поэтому каждый из пучков с заданной проекцией момента на ось  $Oz$  «содержит» различные значения проекций момента на другие оси. Таким образом, каждый из двух пучков, образовавшихся после пролета через первый прибор, будут содержать атомы с  $M_{J_y} = \pm 1/2$  и расщепится надвое во втором приборе, причем из соображений симметрии очевидно, что интенсивности каждого из пучков с  $M_{J_y} = \pm 1/2$  будут одинаковыми<sup>5</sup>.

После второго прибора в каждом из четырех пучков точно определённой будет проекция полного момента атома на ось  $Oy$ , т. е. атомы опять окажутся в суперпозиции состояний с разными  $M_{J_z}$ . В третьем приборе каждый из четырех пучков расщепится на два по оси  $Oz$ . При этом если первый и последний приборы Штерна–Герлаха одинаковы, то две пары пучков сольются и в эксперименте на выходе будет наблюдаться шесть пучков (именно этот случай изображён на рисунке). В общем же случае может наблюдаться и восемь пучков.

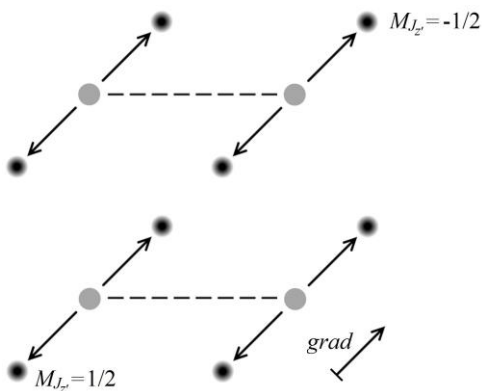
б) Этот случай отличается от предыдущего только последним прибором Штерна–Герлаха. Так как после второго прибора начальный



пучок разделился на пучки с точно определенными значениями проекции на ось  $Oy$ , а градиент магнитного поля в третьем приборе направлен как раз вдоль этой оси, то третий прибор не изменит картины расщепления, а просто увеличит смещение пучков относительно первоначального.

в) После третьего прибора Штерна–Герлаха каждый из четырех пучков разделится на две компоненты, так что в итоге в общем случае получится восемь пучков.

Однако существенно, что при пролете через последний прибор Штерна–Герлаха интенсивности расщепленных пучков будут различными. Например, в пучке с  $M_{J_y} = +1/2$  с большей вероятностью будет присутствовать состояние с  $M_{J_z} = +1/2$ . Поэтому интенсивность пучка с  $M_{J_z} = -1/2$  будет меньше.



В заключение отметим, на примере разобранный задачи удобно обсуждать процесс измерения физической величины в квантовой механике. Действительно, каждый из приборов Штерна–Герлаха проводит «измерение» величины проекции механического момента на соответствующую ось. При этом в «процессе измерения», т. е. при пролете через область

неоднородного магнитного поля, в следующем приборе результат предыдущего измерения «забывается». «Измерительный прибор» с неизбежностью влияет на состояние системы, изменяя ее временную эволюцию.

**7.12(90).** Определить все возможные термы атома углерода для электронных конфигураций  $1s^2 2s^2 2p^1 3\ell$  ( $\ell$  – любое возможное орбитальное квантовое число). Указать все возможные электромагнитные переходы между термами заданных конфигураций и основным термом конфигурации  $1s^2 2s^2 2p^2$ .

**Решение**

Начнем с определения возможных термов атома углерода в представленных конфигурациях. Речь идет о трех возможных конфигурациях (во всех трех случаях речь фактически идет о поиске термов для пары неэквивалентных электронов  $2p3\ell$ , так как все заполненные подоболочки соответствуют нулевым значениям полных орбитального и спинового моментов):

$$1) 1s^2 2s^2 2p3s,$$

$$2) 1s^2 2s^2 2p3p,$$

$$3) 1s^2 2s^2 2p3d.$$

Для первой конфигурации возможные значения  $L=1$ ,  $S=0,1$ , т. е. возможны термы  $^1,^3P$ .

Для второй конфигурации мы уже знаем ответ (см. задачу 7.6.):  $^1SPD$ ,  $^3SPD$ .

Для третьей конфигурации:  $L=1,2,3$ ,  $S=0,1$  и термы:  $^1PDF$ ,  $^3PDF$ .

Далее перейдем к вопросу о переходах между найденными термами и основным термом атома углерода  $^3P$  (согласно правилам Хунда, именно этот терм обладает минимальной энергией в конфигурации  $2p^2$ ). При этом рассмотрим вопрос только об электрических дипольных переходах. Согласно правилу Лапорта, переходы могут происходить только между термами, принадлежащими конфигурациям с различной четностью. Таким образом, из всех термов конфигурации  $1s^2 2s^2 2p3p$  переход в основное состояние будет запрещен.

Согласно еще одному правилу отбора реализуется т. н. запрет интеркомбинаций  $\Delta S=0$ , таким образом, переходы в указанный терм возможны только из триплетных термов.

Правило отбора по суммарному орбитальному квантовому числу  $\Delta L=0, \pm 1$  заставляет заключить, что переход с терма  $^3F$  в основной терм основной конфигурации также запрещен.

В итоге возможными остаются переходы:

$$(1s^2 2s^2 2p3s) ^3P \rightarrow (1s^2 2s^2 2p^2) ^3P,$$

$$(1s^2 2s^2 2p3d) ^3PD \rightarrow (1s^2 2s^2 2p^2) ^3P.$$

**Примечание.** На примере решенной задачи удобно проиллюстрировать очередность применения различных правил отбора. Так, наиболее грубо состояние электронной оболочки атома задается электронной конфигурацией. Мы видели, что фактически правило

Лапорта и определяет возможность перехода между различными конфигурациями. В рамках одной конфигурации, как правило, существует несколько термов, характеризующих более точно структуру электронной оболочки. На этом уровне возникают правила отбора между термами заданных конфигураций  $\Delta S = 0$ ,  $\Delta L = 0, \pm 1$ . Возможна и дальнейшая конкретизация: терм характеризуется тонкой структурой – это группа состояний (мультиплет) с различными значениями квантового числа  $J$ . Если мы хотим проанализировать число компонент тонкой структуры перехода между двумя термами, мы воспользуемся правилом отбора  $\Delta J = 0, \pm 1$ .

**7.13(91).** Оценить величину тонкого расщепления  $K_\alpha$ -линии характеристического рентгеновского излучения атома ртути ( $Z = 80$ ).

### Решение

$K_\alpha$ -линия рентгеновского излучения возникает в многоэлектронном атоме при переходе электрона из  $2p$  подоболочки в  $1s$  подоболочку, из которой тем или иным способом был удален один из электронов. Так как  $2p$  состояние электрона расщеплено спин-орбитальным взаимодействием по квантовому числу  $j = 1/2, 3/2$ , то  $K_\alpha$ -линия является дублетом и состоит из двух близко расположенных линий  $K_{\alpha 1}$  и  $K_{\alpha 2}$ . Поскольку в тяжелых атомах электроны, находящиеся на внутренних оболочках, «чувствуют», прежде всего, электрическое поле ядра с зарядом  $Z \gg 1$ , для оценки величины тонкого расщепления воспользуемся «обычной» формулой тонкой структуры, в которую введем поправку на экранировку со стороны совокупности электронных оболочек, аналогично тому, как это делается при рассмотрении задачи о тонкой структуре атома щелочного металла:

$$\Delta E \approx \frac{\alpha^2 (Z - \sigma)^4 Ry}{n^3 \ell (\ell + 1)}.$$

При этом, поскольку речь идет о  $K_\alpha$  линии, то  $n = 2$ , а  $\ell = 1$ . Учитывая большую величину заряда, можно провести чуть более грубую оценку без учета внутренней экранировки:

$$\Delta E \approx \frac{\alpha^2 (Z - \sigma_{2p})^4 Ry}{16} \cong \frac{\alpha^2 (Z)^4 Ry}{16} \cong 136.4 Ry.$$

**7.14(92).** Определить энергии стационарных состояний отрицательно заряженной бесспиновой частицы в кулоновском потенциале  $V(r) = -e^2/r$  при наложении внешнего однородного магнитного поля.

**Решение**

Для начала нам необходимо будет включить в гамильтониан, описывающий движение частицы, внешнее магнитное поле. Для частицы, обладающей магнитным моментом  $\vec{\mu}$ , энергия взаимодействия с внешним магнитным полем  $V = -(\vec{\mu}\vec{H})$ . Удобно направить ось  $Oz$  (ось квантования момента) вдоль направления вектора  $\vec{H}$ . Тогда имеем  $V = -\mu_z H$ , и вспоминая, что магнитный момент частицы связан с её орбитальным механическим моментом соотношением  $\vec{\mu} = -\frac{e}{2mc}\vec{L}$  ( $\frac{e}{2mc}$  – гиромагнитное отношение), получим

$$V = \frac{e}{2mc}HL_z.$$

С точки зрения квантовой теории мы записали выражение для оператора взаимодействия системы с внешним магнитным полем:

$$\hat{V} = \frac{e}{2mc}H\hat{L}_z.$$

В итоге стационарное уравнение Шредингера будет иметь вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi - \frac{e^2}{r}\psi + H\frac{e}{2mc}\hat{L}_z\psi = E\psi.$$

Поскольку в рассматриваемом случае система характеризуется аксиальной симметрией, ищем решение уравнения Шредингера в виде

$$\psi(\vec{r}) = \Phi(r, \theta)\exp(im_\ell\varphi),$$

где  $m_\ell$  – магнитное квантовое число. Подставляя это представление в уравнение, получим

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial^2\Phi}{\partial r^2}\right) - \frac{\hbar^2}{2mr^2}\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial\Phi}{\partial\theta} + \frac{m_\ell^2}{\sin^2\theta}\Phi\right) - \frac{e^2}{r}\Phi = (E - \mu_B H m_\ell)\Phi.$$

Здесь  $\mu_0 = e\hbar/2mc$  – магнетон Бора. Полученное уравнение эквивалентно уравнению Шредингера для функции  $\Phi(r, \theta)$  в задаче Кеплера.

Для энергий стационарных состояний имеем

$$E_{nlm_\ell} = E_n + m_\ell \mu_0 H = -Ry/n^2 + m_\ell \mu_0 H.$$

Как видно, во внешнем однородном магнитном поле уровень расщепляется на  $2\ell + 1$  компонент по числу возможных проекций орбитального момента на направление магнитного поля. Данный вывод хорошо иллюстрирует смысл названия квантового числа  $m_\ell$ .

**7.15(93).** Какие из приведенных значений фактора Ланде ( $g = 2$ ,  $g = 1$ ,  $g = 0$ ,  $g = -1$ ) возможны? Какой физической ситуации они соответствуют?

### Решение

Фактор Ланде определяется выражением:

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

Рассмотрим последовательно все приведенные варианты:

1)  $g = 2$ .

Из выражения для фактора Ланде видно, что этот случай реализуется при  $L = 0$  и  $S \neq 0$ , т.е. такой фактор Ланде характерен для  $S$  термов. Одним из частных случаев здесь является единственный электрон в  $s$ -состоянии, в этом случае фактор Ланде равен гиромангнитному отношению для электрона.

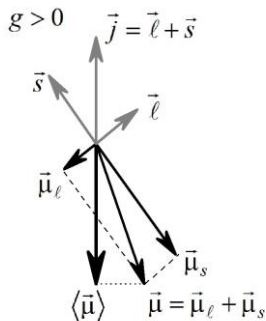
2)  $g = 1$ .

Такой фактор Ланде характерен для любого синглетного терма, т.е. терма с  $S = 0$ .

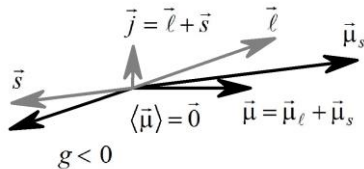
3)  $g = 0$ .

Нулевой фактор Ланде физически означает, что эффективный магнитный момент ортогонален полному механическому моменту электронной оболочки атома. Такое значение реализуется, например, при  $L = 3$ ,  $S = 2$ ,  $J = 1$ .

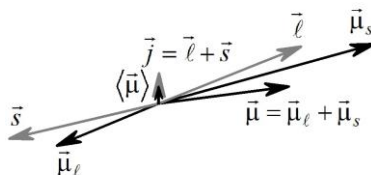
4)  $g = -1$ .



$g = 0$



$g < 0$



Оказывается, что возможны и отрицательные значения фактора Ланде. В частности при значениях квантовых чисел моментов  $L = 5$ ,  $S = 4$ ,  $J = 1$  получим  $g = -1$ . Физически этот случай соответствует острому углу между эффективным магнитным моментом электронной оболочки атома и полным механическим моментом. В такой ситуации эффективный магнитный момент системы «смотрит» в направлении вектора  $\vec{j}$ .

На представленных рисунках изображены векторные диаграммы ориентации моментов в пространстве, соответствующие случаям  $g > 0$ ,  $g = 0$ ,  $g < 0$

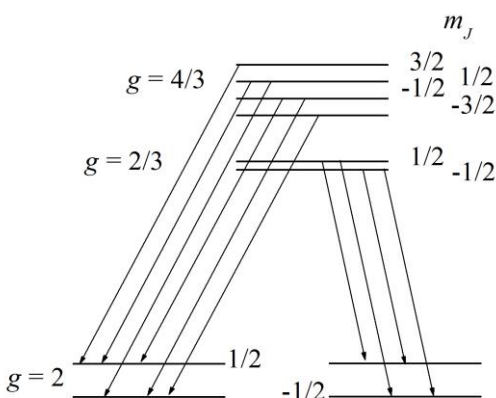
**7.16(93).** Рассмотреть эффекты Зеемана и Пашена–Бака на головной линии серии Лаймана атома водорода. Оценить величину напряженности магнитного поля, при котором эффект Зеемана сменяется эффектом Пашена–Бака.

**Решение**

Головная линия серии Лаймана имеет тонкую дублетную структуру и представлена двумя переходами:  $2p_{3/2} \rightarrow 1s_{1/2}$  и  $2p_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$ . В магнитном поле каждый из трех упомянутых уровней расщепляется, в результате чего обе спектральные линии также испытывают расщепление.

Рассмотрим сначала случай слабого поля. Факторы Ланде для рассматриваемых уровней равны:  $g(2p_{3/2}) = 4/3$ ,  $g(2p_{1/2}) = 2/3$  и  $g(1s_{1/2}) = 2$ . В

слабом поле количество возникающих подуровней соответствует числу проекций  $j$ , т. е. равно  $2j + 1$ . Схема расщепления уровней и разрешённые правилами отбора переходы приведены на рисунке.



Так как все факторы Ланде различны, каждая спектральная линия в слабом поле расщепится на максимально возможное число компонент, т. е. все разрешённые переходы будут сопровождаться излучением своей собственной длины волны. Правила отбора, позволяющие здесь подсчитать число спектральных линий, имеют вид:  $\Delta J = 0, \pm 1$ . Так, линия  $2p_{3/2} \rightarrow 1s_{1/2}$  расщепится на шесть компонент, а  $2p_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$  – на четыре. Знак факторы Ланде, легко подсчитать также величину расщепления. Энергия подуровня в магнитном поле отличается от энергии нерасщеплённого уровня на величину  $\Delta E = \mu_0 g H m_J$ , где  $m_J$  – проекция полного момента на направление магнитного поля. Таким образом, частоты линий смещаются на величину  $\Delta\omega_{12} = \frac{\mu_0 H}{\hbar} (g_1 m_{J_1} - g_2 m_{J_2})$ . В итоге смещение частоты для линии  $2p_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$  имеет вид:

$$\Delta\omega_{12} = \frac{\mu_0 H}{\hbar} \left\{ \pm \frac{4}{3}; \pm \frac{2}{3} \right\},$$

$$\text{а для линии } 2p_{3/2} \rightarrow 1s_{1/2} - \Delta\omega_{12} = \frac{\mu_0 H}{\hbar} \left\{ \pm \frac{5}{3}; \pm 1; \pm \frac{1}{3} \right\}.$$

В случае сильного поля магнитные моменты, связанные с орбитальным движением и со спином, взаимодействуют с полем независимо. В этом случае расщепление спектральной линии определяется выражением  $\Delta\omega_{12} = \frac{\mu_0 H}{\hbar} (\Delta m_L + 2\Delta m_S)$ , где  $\Delta m_L$  и  $\Delta m_S$  – изменения проекция орбитального и спинового момента электронной оболочки атома при электромагнитном переходе. С учетом правил отбора  $\Delta m_L = 0, \pm 1$  и  $\Delta m_S = 0$  находим, что каждая спектральная линия будет наблюдаться в виде нормального лоренцевского триплета, который характеризуется расщеплением  $\Delta\omega_{12} = \frac{\mu_0 H}{\hbar} \{0; \pm 1\}$ .

В заключение оценим величину магнитного поля, при котором эффект Зеемана сменится эффектом Пашена–Бака. Критерием сильного поля является условие преобладания энергии взаимодействия атома с магнитным полем над величиной тонкого расщепления его уровней, т. е.

$$\mu_0 H > \frac{\alpha^2 Z^4 Ry}{n^3 \ell(\ell+1)} \Big|_{2p} = \frac{\alpha^2 Z^4 Ry}{16}.$$

В результате получаем оценку на величину магнитного поля:

$$H > \frac{\alpha^2 Z^4 Ry}{16\mu_0} \approx 7.8 \cdot 10^3 \text{ Э.}$$



## Глава 8. Физика молекул

1. В двухатомной молекуле стационарные состояния электронов можно охарактеризовать точно определенным значением проекции орбитального момента на межъядерную ось. Состояния электронов в оболочке обозначаются в соответствии со схемой:

$$\begin{array}{ll} \text{проекция момента} & \lambda = |m_\ell| = 0, 1, 2, 3 \dots \\ \text{состояние электрона} & \sigma, \pi, \delta, \phi \end{array}$$

Здесь квантовое число  $m_\ell$  определяют проекцию орбитального момента электрона на ось молекулы.

2. Квантовые числа, характеризующие состояние электронной оболочки молекулы:

а) проекция орбитального момента электронной оболочки на ось молекулы

$$\Lambda = \left| \sum m_\ell \right|,$$
$$\begin{array}{ll} \text{проекция момента} & \Lambda = 0, 1, 2, 3, \dots \\ \text{состояние оболочки} & \Sigma, \Pi, \Delta, \Phi, \dots \end{array}$$

б) мультиплетность  $2S + 1$ ,  $S$  – полный спин

3. Термы электронной оболочки молекулы принято записывать в виде:  $^{2S+1}\Lambda$ ,

Например  $^1\Sigma$ ,  $^3\Pi$ ,  $^2\Delta$ , ... и т. п.

Основной терм двухатомной молекулы, за редкими исключениями,  $^1\Sigma$ .

4. Энергия колебаний двухатомной молекулы в приближении гармонического осциллятора

$$E_v = \hbar \Omega (v + 1/2),$$

где  $\Omega = \sqrt{k/\mu}$  – частота (гармонических) колебаний молекулы,  $k$  – постоянная квазиупругой силы,  $\mu = M_1 M_2 / (M_1 + M_2)$  – приведенная масса,  $M_1$  и  $M_2$  – массы атомов,  $v$  – колебательное квантовое число,  $v = 0, 1, 2, 3, \dots$

5. Энергия ангармонических колебаний двухатомной молекулы, описываемой потенциалом Морзе:

$$E_v = \hbar \Omega (v + 1/2) + \kappa \hbar \Omega (v + 1/2)^2.$$

где  $\kappa = \hbar \Omega / 4D$  – постоянная ангармонизма;  $D$  – энергия диссоциации молекулы.

6. Вращательная энергия жесткой двухатомной молекулы:

$$E_J = \frac{\hbar^2}{2I} J(J+1) = BJ(J+1),$$

где  $B = \hbar^2/2I$  – вращательная постоянная,  $I = \mu R_0^2$  – момент инерции двухатомной молекулы,  $\mu$  – приведенная масса молекулы,  $R_0$  – равновесное расстояние между ядрами.

7. Ядерный момент количества движения молекулы, вращающейся с частотой  $\omega$ :  $L = I\omega = \hbar\sqrt{J(J+1)}$ , где  $J$  – вращательное квантовое число,  $J = 0, 1, 2, \dots$

8. Правила отбора для электрических дипольных излучательных переходов:

$$\Delta L = 0, \pm 1, \quad \Delta S = 0,$$

$\Delta v = \pm 1$  (приближение гармонического осциллятора для колебательно-вращательных переходов в гетероядерных молекулах),

$$\Delta J = \begin{cases} \pm 1 & \text{для гомоядерных молекул,} \\ 0, \pm 1 & \text{для гетероядерных молекул.} \end{cases}$$

### Задачи

**8.1(95).** Показать, что в системе с аксиальной симметрией (например, электронная подсистема двухатомной молекулы) стационарные состояния можно характеризовать определенным значением проекции орбитального момента на ось системы.

### Решение

Пусть система имеет ось симметрии. Это означает, что поворот на любой угол вокруг такой оси не изменяет физического состояния такой системы, т. е. гамильтониан такой системы, который определяется, в том числе, и потенциальными полями, должен быть инвариантен относительно любого поворота вокруг указанной оси. Математически, это требование сводится к тому, что в сферической системе координат с осью  $O_z$ , направленной вдоль оси симметрии, потенциальная энергия взаимодействия не должна явно зависеть от аксиального угла, т. е.  $V(\vec{r}) = V(r, \theta)$ . Отметим, что при этом орбитальный механический момент может и не являться интегралом движения (так как поле, вообще говоря, не центральное).

Тогда, учитывая, что оператор проекции момента импульса на ось системы будет задаваться хорошо известным выражением  $\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$ , видно, что оператор проекции момента импульса будет коммутировать с гамильтонианом системы, т. е.  $[\hat{H}, \hat{L}_z] = 0$ . Это означает, что волновые функции стационарных состояний можно построить таким образом, чтобы они были также собственными функциями рассматриваемого оператора. Таким образом, мы приходим к выводу, что в аксиально-симметричной системе стационарные состояния характеризуются также определенными значениями проекции момента импульса на ось симметрии системы. Соответствующие волновые функции стационарных состояний могут быть представлены в виде

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = \psi(r, \theta) \frac{\exp(im_\ell \varphi)}{\sqrt{2\pi}},$$

где квантовое число  $m_\ell$  задает величину проекции орбитального момента на ось системы, а функция  $\psi(r, \theta)$  удовлетворяет уравнению

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial^2 r\psi}{\partial r^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} + \frac{m_\ell^2}{\sin^2 \theta} \psi \right) = E\psi(r, \theta).$$

В гомоядерных двухатомных молекулах есть еще одна степень симметрии – инверсия координат относительно центра межатомной оси. Эта симметрия приводит к тому, что энергии состояний молекулы, которые отличаются друг от друга только знаком проекции момента, совпадают. Соответственно состояния в таких молекулах принято характеризовать величиной  $\lambda = |m_\ell|$ .

Так как движение ядер происходит в молекулах гораздо медленнее, чем движение электронной подсистемы, стандартным подходом при изучении физики молекул является факторизация волновой функции на два сомножителя: один из них описывает движение электронов, зависящее от межатомного расстояния  $\bar{R}_N$ , как от параметра, а второй – движение ядер атомов в усредненном потенциале, создаваемом электронной оболочкой:

$$\Psi = \Psi_e(\{\bar{r}_e\}, \bar{R}_N) \Phi_N(\bar{R}_N).$$

Здесь  $\Psi_e(\{\bar{r}_e\}, \bar{R}_N)$  и  $\Phi_N(\bar{R}_N)$  – волновые функции электронной и ядерной подсистем молекулы,  $\{\bar{r}_e\}$  – совокупность электронных координат молекулы. Это приближение носит название адиабатического приближения или приближения Борна–Оппенгеймера. Оно позволяет разделить рассмотрение задачи о динамике молекулы на две: сначала

решается стационарное уравнение Шредингера для электронов при заданном межатомном расстоянии, а потом ищется решение для динамики ядерной подсистемы. Потенциал, в котором движутся ядра молекулы, включающий в себя потенциал, создаваемый электронной подсистемой, называется молекулярным термом.

**8.2(96).** Определить молекулярные термы, которые могут образовывать атомы O и H, C и N, C и O, находящиеся в основном состоянии.

### Решение

Все три пары атомов рассматриваются одинаково. Для этого необходимо хорошо владеть методом определения основного атомного терма, описанным в главе 7.

А) Рассмотрим пару атомов O и H. Основные состояния этих атомов определяются в соответствии с правилами Хунда и правилом Ланде, ими соответственно являются  ${}^3P_2$  и  ${}^2S_{1/2}$ , т. е.  $L_1 = 1$ ,  $S_1 = 1$  и  $L_2 = 0$ ,  $S_2 = 1/2$ . Таким образом, суммарная проекция орбитального момента может принимать значения  $L_\Sigma = 0, \pm 1$ , т. е. квантовое число  $\Lambda = 0, 1$ , а квантовое число суммарного спина электронной оболочки  $S_\Sigma = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$ .

В результате возможными оказываются молекулярные термы:

$${}^{2,4}\Sigma \text{ и } {}^{2,4}\Pi.$$

Б) Рассмотрим пару атомов C и O. Основные состояния этих атомов равны соответственно  ${}^3P_0$  и  ${}^3P_2$ , т. е.  $L_1 = L_2 = 1$ ,  $S_1 = S_2 = 1$ . Таким образом, суммарная проекция орбитального момента может принимать значения  $L_\Sigma = 0, \pm 1, \pm 2$ , т. е.  $\Lambda = 0, 1, 2$ , а квантовое число суммарного спина электронной оболочки  $S_\Sigma = 0, 1, 2$ .

В результате возможными оказываются молекулярные термы:

$${}^{1,3,5}\Sigma, {}^{1,3,5}\Pi \text{ и } {}^{1,3,5}\Delta.$$

В) Рассмотрим пару атомов C и N. Основные состояния этих атомов равны соответственно  ${}^3P_0$  и  ${}^4S_{3/2}$ , т. е.  $L_1 = 1$ ,  $S_1 = 1$  и  $L_2 = 0$ ,  $S_2 = 3/2$ . Таким образом, суммарная проекция орбитального момента может принимать значения  $L_\Sigma = 0, \pm 1$ , т. е.  $\Lambda = 0, 1$ , а квантовое число суммарного спина электронной оболочки  $S_\Sigma = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}$ .

В результате возможными оказываются молекулярные термы:

$${}^{2,4,6}\Sigma \text{ и } {}^{2,4,6}\Pi.$$

**8.3(97).** Молекулярный терм некоторой молекулы задается выражением  $V_{eff}(R) = D(R_0^2/R^2 - 2R_0/R)$ . Найти колебательно-вращательный спектр молекулы.

### Решение

Так как движение ядер происходит в молекулах гораздо медленнее, чем движение электронной подсистемы, стандартным подходом при изучении физики молекул является факторизация волновой функции на два множителя: один из них описывает движение электронов, зависящее от межатомного расстояния  $\vec{R}_N$  как от параметра, а второй – движение ядер атомов в усредненном потенциале, создаваемом электронной оболочкой:

$$\Psi = \Psi_e(\{\vec{r}_e\}, \vec{R}_N) \Phi_N(\vec{R}_N).$$

Здесь  $\Psi_e(\{\vec{r}_e\}, \vec{R}_N)$  и  $\Phi_N(\vec{R}_N)$  – волновые функции электронной и ядерной подсистем молекулы,  $\{\vec{r}_e\}$  – совокупность электронных координат молекулы. Это приближение носит название адиабатического приближения или приближения Борна–Оппенгеймера. Оно позволяет разделить рассмотрение задачи о динамике молекулы на две: сначала решается стационарное уравнение Шредингера для электронов при заданном межатомном расстоянии, а потом ищется решение для динамики ядерной подсистемы. Потенциал, в котором движутся ядра молекулы, включающий в себя потенциал, создаваемый электронной подсистемой, называется молекулярным термом.

По условию задачи молекулярный терм задан как

$$V_{eff}(R) = D(R_0^2/R^2 - 2R_0/R).$$

Поэтому для ядерной волновой функции имеем уравнение

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \psi + D \left( \frac{R_0^2}{R^2} - 2 \frac{R_0}{R} \right) \psi = E \psi.$$

Отделяя угловую часть волновой функции  $\psi = \frac{\chi(R)}{R} Y_{JM}(\theta, \varphi)$ , для радиальной функции  $\chi(R)$  получим

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 \chi}{dR^2} + D \left( \frac{R_0^2}{R^2} - 2 \frac{R_0}{R} \right) \chi + \frac{\hbar^2 J(J+1)}{2\mu R^2} \chi = E \chi.$$

Вводя эффективное квантовое число  $J^*$  с помощью соотношения  $\frac{\hbar^2 J^*(J^* + 1)}{2\mu} = DR_0^2 + \frac{\hbar^2 J(J + 1)}{2\mu}$ , полученное уравнение сведем к виду уравнения для радиальной волновой функции в задаче Кеплера, которое можно решить в приближении квантового дефекта (см. задачу 5.6). Для уровней энергии получим

$$E_{v,J} = -\frac{m}{2\hbar^2}(2DR_0)^2 \frac{1}{(v + \Delta_J)^2}, \text{ где } \Delta_J = \frac{1}{2} + \sqrt{\frac{2\mu DR_0^2}{\hbar^2} + (J + 1/2)^2}.$$

Считая, что  $v, J \ll 2\mu DR_0^2/\hbar^2$  (не слишком сильное колебательное и вращательное возбуждение), для уровней энергии  $E_{v,J}$  получим

$$E_{v,J} = -D + \hbar\Omega(v + 1/2) + \frac{\hbar^2(J + 1/2)^2}{2\mu R_0^2} - \frac{3\hbar^2(v + 1/2)^2}{2\mu R_0^2} - \frac{3\hbar^3(J + 1/2)(v + 1/2)}{2\mu^2 R_0^4 \Omega},$$

где  $\Omega = \sqrt{2D/\mu R_0^2}$  – частота молекулярных колебаний.

В полученном выражении второе и третье слагаемые дают энергию колебательного и вращательного движения, четвертое – учитывает ангармонизм колебаний, пятое дает поправку к энергии, связанную с влиянием колебаний и вращения ядер друг на друга.

**8.4(98).** Показать, что в гомоядерных двухатомных молекулах в дипольном приближении электромагнитные переходы в пределах одного электронного терма запрещены.

### Решение

Как мы видели в главе 6, вероятность дипольного перехода определяется квадратом модуля матричного элемента дипольного момента системы.

Так как в данной задаче речь идет о переходе в рамках одного терма, то это говорит о том, что электронная волновая функция не изменяется в процессе перехода. Рассмотрим матричные элементы дипольного момента, который складывается из дипольного момента всех составляющих молекулы:

$$\langle \Psi_i | e\bar{R}_N - e \sum_e \bar{r}_e | \Psi_f \rangle.$$

Поскольку молекула является гомоядерной, то среднее значение дипольного момента ядерной подсистемы относительно центра межмолекулярной оси тождественно равно нулю. Таким образом, остается только величина, соответствующая электронной подсистеме:

$$\langle \Psi_i | -e \sum_e \vec{r}_e | \Psi_f \rangle = -e \langle \Psi_{e,i}(\vec{r}) \Phi_{N,i}(\vec{R}) | \sum_e \vec{r}_e | \Psi_{e,i}(\vec{r}) \Phi_{N,f}(\vec{R}) \rangle.$$

Даже если начальное и конечное ядерные состояния не ортогональны друг другу, последний интеграл все равно равен нулю. Так как гомоядерная молекула характеризуется центральной симметрией относительно центра межмолекулярной оси, то под знаком интеграла с электронной частью стоит нечетная функция, что и дает нулевое среднее значение.

Равенство нулю среднего значения дипольного момента эквивалентно равенству нулю вероятности дипольного перехода. В этом случае и говорят, что переход запрещен.

**8.5(99).** В двухатомной молекуле происходит электромагнитный переход из основного колебательного состояния возбуждённого электронного терма на нижележащий электронный терм. Определить вероятность колебательного возбуждения молекулы, если энергии колебательных квантов на обоих термах одинаковы, а равновесное межъядерное расстояние на верхнем терме в два раза больше, чем на нижнем терме  $R^* = 2R_g$ . Колебания молекулы в обоих электронных состояниях считать гармоническими.

### Решение

Считая колебания гармоническими, мы можем записать колебательную часть волновой функции обоих термов в виде функций гармонического осциллятора. В частности, выражение для основного колебательного состояния нижележащего терма будет иметь вид:

$$\Phi_{v=0}(R) = \sqrt{\frac{1}{a\sqrt{\pi}}} \exp\left(-\frac{(R - R_g)^2}{2a^2}\right).$$

Здесь величина  $a = \sqrt{\hbar/\mu\omega}$  задает величину колебательного кванта молекулы. Величина  $\mu$  соответствует приведённой массе ядерной подсистемы. Аналогично для основного колебательного состояния возбуждённого электронного терма имеем:

$$\Phi_{v=0}^{(exc)}(R) = \sqrt{\frac{1}{a\sqrt{\pi}}} \exp\left(-\frac{(R - 2R_g)^2}{2a^2}\right).$$

Считая, что в колебательном переходе межъядерное расстояние практически не меняется, разложим колебательную часть волновой функции возбуждённого терма по колебательным состояниям нижележащего терма. Тогда квадраты модулей коэффициентов такого

разложения будут определять вероятности попадания в то или иное колебательное состояние после перехода.

При этом коэффициент  $C_0 = \langle \Phi_{v=0}(R) | \Phi_{v=0}^{(exc)}(R) \rangle$  будет соответствовать амплитуде вероятности перехода в колебательно невозбуждённое состояние. Вероятность же колебательного возбуждения задается тогда простым выражением:

$$P = 1 - |C_0|^2 = 1 - \left| \langle \Phi_{v=0}(R) | \Phi_{v=0}^{(exc)}(R) \rangle \right|^2.$$

Остается только вычислить интеграл:

$$\langle \Phi_{v=0}(R) | \Phi_{v=0}^{(exc)}(R) \rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-((x - R_g)^2 + (x - 2R_g)^2) / 2a^2\right) dx.$$

Этот интеграл равен:

$$\langle \Phi_0(R) | \Phi_0^{(exc)}(R) \rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\left((x - \frac{3}{2}R_g)^2 + \frac{1}{4}R_g^2\right) / a^2\right) dx = \exp\left(-\frac{R_g^2}{4a^2}\right).$$

Таким образом, вероятность колебательного возбуждения молекулы равна:

$$P = 1 - \exp\left(-\frac{\mu\omega R_g^2}{2\hbar}\right).$$

**8.6(100).** Определить вероятность колебательного возбуждения молекулы NaCl при внезапном включении внешнего однородного постоянного электрического поля с напряжённостью  $E = 10^6$  В/см, направленного вдоль оси молекулы. В начальный момент времени молекула находилась в основном колебательном состоянии. Постоянная квазиупругой силы  $k = 1.01 \cdot 10^5$  дн/см, равновесное расстояние между ядрами  $R_0 = 2.361$  Å. Колебания считать гармоническими.

### Решение

Вследствие очень быстрого (мгновенного) включения электрического поля можно считать, что волновая функция ядерной подсистемы не успела измениться. Поэтому наша задача – найти разложение этой начальной волновой функции по собственным функциям возмущённого гамильтониана, соответствующего молекуле при наличии внешнего электрического поля. Соответственно коэффициенты разложения определяют амплитуды вероятности возбуждения различных колебательных состояний.



Если в отсутствии внешнего поля колебательная часть энергии описывается гамильтонианом вида  $U_0 = \frac{m\omega^2(R-R_0)^2}{2}$ , то после включения внешнего поля, считая молекулу состоящей из ионов  $\text{Na}^+$  и  $\text{Cl}^-$ , в зависимости от направления поля получим:

$$U_E = \frac{m\omega^2(R-R_0)^2}{2} \pm eER,$$

где знак «плюс» соответствует направлению вектора  $\vec{E}$  от атома натрия к атому хлора, а «минус» – обратному. Преобразуем выражение для  $U_E$ :

$$U_E = \frac{m\omega^2}{2} \left[ \left( R - \left( R_0 \mp \frac{eE}{m\omega^2} \right) \right)^2 + R_0^2 - \left( R_0 \mp \frac{eE}{m\omega^2} \right)^2 \right].$$

В данной задаче изменение энергий колебательных состояний нас не интересует, общую добавку  $U_E = \frac{m\omega^2}{2} \left[ R_0^2 - \left( R_0 \mp \frac{eE}{m\omega^2} \right)^2 \right]$  к энергиям всех уровней можно отбросить. Тогда гамильтониан молекулы в поле будет иметь вид:

$$U_E = \frac{m\omega^2}{2} \left[ \left( R - \left( R_0 \mp \frac{eE}{m\omega^2} \right) \right)^2 \right].$$

Таким образом, включение внешнего поля приводит к изменению равновесного межатомного расстояния, причем в зависимости от направления поля оно либо «сжимает» молекулу, либо «растягивает».

Колебательная часть волновой функции основного состояния молекулы в поле запишется следующим образом:

$$\Phi_{v=0}^E(R) = \sqrt{\frac{1}{a\sqrt{\pi}}} \exp \left( - \left[ R - \left( R_0 \mp \frac{eE}{m\omega^2} \right) \right]^2 / 2a^2 \right).$$

Для определения вероятности колебательного возбуждения молекулы далее можно поступить в точности, как в предыдущей задаче. А именно, определим вероятность того, что колебательное состояние молекулы при включении поля не изменилось. Проецируя волновую функцию  $\Phi_{v=0}^E(R)$  на волновую функцию основного состояния молекулы в отсутствие поля  $\Phi_{v=0}(R)$ , найдем вероятность того, что молекула не будет возбуждена:

$$P_0 = |C_0|^2 = \left| \langle \Phi_v(R) | \Phi_v^E(R) \rangle \right|^2.$$

Учитывая, что,

$$\langle \Phi_v(R) | \Phi_v^E(R) \rangle = \exp \left( - \left[ R_0^2 + \left( R_0 \mp \frac{eE}{m\omega^2} \right) - 2 \left( R_0 \mp \frac{eE}{2m\omega^2} \right) \right]^2 / 2a^2 \right),$$

в итоге получаем:

$$\langle \Phi_v(R) | \Phi_v^E(R) \rangle = \exp \left( - \frac{1}{4a^2} \left[ \frac{eE}{m\omega^2} \right]^2 \right) = \exp \left( - \frac{m\omega}{4\hbar} \left[ \frac{eE}{m\omega^2} \right]^2 \right).$$

Таким образом, сама вероятность колебательного возбуждения задается величиной, которая не зависит ни от направления поля вдоль молекулярной оси, ни от равновесного расстояния между атомами в молекуле:

$$P^* = 1 - P_0 = 1 - \exp \left( - \frac{m\omega}{2\hbar} \left[ \frac{eE}{m\omega^2} \right]^2 \right) \approx 0.03\% .$$

**8.7(101).** Оценить характерное время жизни относительно электромагнитного перехода колебательно-возбужденной молекулы NaCl. Колебания молекулы считать гармоническими.

### Решение

Вспользуемся результатами задачи 6.2, в которой была исследована вероятность спонтанных переходов между состояниями для частицы, находящейся в гармоническом потенциале.

Там мы получили, что вероятность спонтанного перехода в единицу времени между состояниями с номерами  $n$  и  $n-1$  задается выражением:

$$A_{n,n-1} = \frac{2n\omega^2 e^2}{3\mu c^3} .$$

Характерное время жизни можно определить, как  $\tau \approx \frac{1}{A} = \frac{3\mu c^3}{2\omega^2 e^2} \frac{1}{n}$ .

Здесь в качестве массы  $m$  необходимо использовать приведенную массу ядерной подсистемы  $\mu \approx 13.9m_p$ . Остальные параметры молекулы приведены в условии предыдущей задачи.

Численное значение данной величины составляет:

$$\tau \approx \frac{1}{A} = \frac{3\mu c^3}{2\omega^2 e^2} \approx 0.9 \text{ с} .$$

## Глава 9. Макроскопические системы

В данном разделе рассматриваются задачи, иллюстрирующие применение квантовой теории для описания явлений макромира (электронный газ в металле, теплоёмкость газов и др.) и даже ряда астрофизических приложений («белые карлики», коллапсирование массивных звезд). Такие задачи интересны тем, что представляют собой макроскопические квантовые эффекты, т. е. для их понимания принципиально необходимо использование квантовомеханических представлений о строении вещества. Ряд задач иллюстрирует также, как на основе микроскопической теории можно вычислить макроскопические характеристики вещества (диэлектрическую восприимчивость газов, коэффициент линейного расширения твердых тел).

**9.1(102).** Оценить среднюю кинетическую энергию электронного газа в металлах.

### Решение

Рассмотрим электронный газ в металле объемом  $V = L^3$ . В первом приближении будем считать, что газ является идеальным, т. е. взаимодействием между электронами можно пренебречь.

Число различных состояний для электронных волн в интервале волновых векторов от  $\vec{k}$  до  $\vec{k} + d\vec{k}$ , приходящихся на единицу объема, можно представить как

$$dN/V = 2 \frac{d^3k}{(2\pi)^3}.$$

Здесь мы учли наличие двух состояний по спину электрона, соответствующих одному и тому же значению  $\vec{k}$ . Электроны являются фермионами, поэтому в каждом состоянии может находиться не более одного электрона. Значит, даже при нулевой температуре электроны занимают состояния с ненулевой энергией, в результате чего энергия электронного газа оказывается отличной от нуля.

Учитывая, что энергия электрона определяется выражением  $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ , определим максимально возможную энергию состояния  $\epsilon_F$  (энергия Ферми), которое окажется занятым при нулевой температуре, из условия

$$n_e = 2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3},$$

где  $n_e$  – концентрация свободного электронного газа, а интеграл берется по всем состояниям, занятым электронами. Учитывая, что

$$d^3k = k^2 dk d\Omega,$$

где  $d\Omega$  – элемент телесного угла, и выполняя интегрирование по угловым координатам, получим

$$n_e = \frac{1}{\pi^2 \hbar^2} \int_0^{p_F} p^2 dp = \frac{p_F^3}{3\pi^2 \hbar^2},$$

где  $p_F = \sqrt{2m\varepsilon_F}$  – импульс Ферми (максимально возможное значение импульса электрона при нулевой температуре).

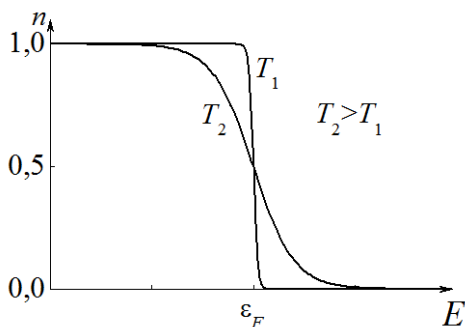
Считая концентрацию электронов в металле известной, для импульса и энергии Ферми найдем

$$p_F = \hbar (3\pi^2 n_e)^{1/3},$$

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n_e)^{2/3}.$$

Таким образом, при температуре газа, равной абсолютному нулю, реализуется распределение по состояниям в виде «ступеньки», представленной на рисунке. Можно показать, что при температурах отличных от нуля, ступенька «размывается», причем ширина «размытия» определяется температурой. В общем случае распределение по энергетическим состояниям для электронного газа подчиняется распределению Ферми–Дирака:

$$n(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - \mu(T)}{kT}\right) + 1},$$



где  $\mu(T)$  – химический потенциал газа, причем при низких температурах  $\mu \approx \varepsilon_F$ .

Можно показать, что если температура газа много больше энергии Ферми ( $kT \gg \varepsilon_F$ ), то статистика Ферми–Дирака переходит в статистику

Максвелла–Больцмана. В случае, если  $kT \leq \varepsilon_F$  ферми-газ

называется вырожденным, и его свойства существенным образом отличаются от классического идеального газа.

Оценим энергию Ферми, например для меди. Будем считать, что на каждый атом меди приходится примерно один электрон проводимости. Плотность меди  $\rho \approx 8.92 \text{ г/см}^3$ , атомная масса  $\mu \approx 63.6 \text{ г/моль}$ . Концентрация носителей заряда

$$n_e = \frac{n\rho N_A}{\mu} \approx 0.844 \cdot 10^{23} \text{ см}^{-3},$$

где  $N_A$  – число Авогадро, а энергия Ферми

$$\varepsilon_F \approx 7.0 \text{ эВ}.$$

Энергия в 1 эВ соответствует температуре  $T \approx 11605 \text{ К}$ , откуда видно, что при комнатной температуре электронный газ в меди является сильно вырожденным. Тогда в качестве функции плотности распределения электронов мы можем взять «ступеньку». Найдём среднюю кинетическую энергию электронов по этому распределению.

$$\left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle = \frac{1}{n_e} \int_0^{p_F} \frac{4\pi p^2 \cdot 2}{(2\pi\hbar)^3} \frac{p^2}{2m} dp = \frac{1}{n_e} \frac{p_F^5}{10\pi^2\hbar^3 m} = \frac{3p_F^2}{10m} = \frac{3}{5} \varepsilon_F.$$

Для рассматриваемой нами меди

$$\left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle \approx 4.2 \text{ эВ}.$$

Отметим, что чем больше концентрация электронов, тем больше оказывается их средняя энергия.

На качественном уровне задачу можно решить так. Полагая, что на каждый электрон приходится объем  $L^3/N$ , из соотношения неопределенностей  $\Delta p \Delta x \sim \Delta p L/N^{1/3} \sim \hbar$  найдем характерное значения импульса электронов  $p \sim \Delta p \sim \frac{\hbar}{L} N^{1/3}$ , откуда  $\bar{E} \sim \frac{p^2}{2m} \sim \frac{\hbar^2}{2m} (N/V)^{2/3}$ .

**9.2(103).** Показать, что для вырожденного электронного газа степень его идеальности возрастает с увеличением плотности.

### Решение

Идеальный газ – это газ, в котором взаимодействием между частицами можно пренебречь<sup>1</sup>. Газ будет тем «более идеальным», чем меньше отношение характерного значения потенциальной энергии

<sup>1</sup> Это взаимодействие играет роль только в процессе установления термодинамического равновесия.

взаимодействия частиц к характерной величине кинетической энергии электронов. Будем считать, что взаимодействие электронов является парным и определяется законом Кулона. Тогда искомое отношение (параметр идеальности)

$$\zeta = \frac{\langle \Delta V \rangle}{\langle T \rangle} = \frac{\langle e^2 / r \rangle}{\langle p^2 / 2m \rangle}.$$

Согласно результату предыдущей задачи,

$$\langle p^2 / 2m \rangle \sim n^{2/3},$$

где  $n$  – концентрация частиц газа. Для потенциальной энергии справедлива зависимость

$$\langle e^2 / r \rangle \sim n^{1/3}.$$

Тогда

$$\zeta \sim n^{-1/3},$$

т. е. вырожденный электронный газ тем более идеален, чем выше его плотность.

**Примечание.** Из решения задачи следует, что при малых концентрациях электронного газа он является неидеальным, что делает возможным его «кристаллизацию», т. е. образование регулярной структуры (так называемый вигнеровский кристалл – по имени американского физика венгерского происхождения, впервые её предсказавшего). В металлах газ является почти идеальным, так что образование электронного вигнеровского кристалла там не наблюдается. Однако вигнеровская кристаллизация может быть осуществлена в двумерных структурах. Впервые вигнеровский кристалл наблюдался американскими учёными Граймсом и Адамсом в 1979 г. при изучении электронов на поверхности жидкого гелия.

**9.3(104).** В модели Томаса–Ферми многоэлектронный атом представляет собой систему, в которой давление вырожденного электронного газа уравнивается силами притяжения электронов к ядру. Определить зависимость размера атома от заряда  $Z$ .

### Решение

Как обсуждалось при решении задачи 9.1, в вырожденном ферми-газе есть все значения импульса вплоть до импульса Ферми. Будем считать, что электроны из некоторой области пространства принадлежат ядру, если импульс Ферми для этой области не позволяет электронам

оторваться от системы на бесконечно большое расстояние. То есть, если  $\varphi(r)$  – потенциал, создаваемый системой на расстоянии  $r$  от ядра (потенциал отсчитывается от бесконечно удалённой точки), то предельное значение импульса Ферми определяется как

$$\frac{p_F^2}{2m} = e\varphi(r).$$

Из этого уравнения в соответствии с промежуточным результатом задачи 9.1 можно найти связь между концентрацией электронов и электростатическим потенциалом:

$$n(r) = \frac{1}{3\pi^2} \left( \frac{\sqrt{2me\varphi(r)}}{\hbar} \right)^3.$$

Заметим, что распределение электронов вместе с ядром создаёт пространственную плотность заряда

$$\rho(r) = Ze\delta(\vec{r}) - en(r),$$

а электростатический потенциал подчиняется уравнению Пуассона:

$$\Delta\varphi(r) = -4\pi\rho(r).$$

Уравнение для  $\varphi(r)$  тогда может быть записано как

$$\Delta\varphi = \frac{4e}{3\pi} \left( \frac{\sqrt{2me}}{\hbar} \right)^3 \varphi^{3/2} - Ze\delta(\vec{r}),$$

причем решение должно удовлетворять условию  $\varphi(r) \rightarrow 0$  при  $r \rightarrow \infty$ .

Обезразмерим это уравнение. Характерный параметр длины,  $L$  и будет играть роль размера атома:  $f = \frac{L}{Ze} \varphi$ ,  $\vec{x} = \frac{\vec{r}}{L}$ ,  $\Delta_x = L^2 \Delta$ :

$$\Delta_x f = \frac{4}{3\pi} \sqrt{Z} \left( 2 \frac{me^2}{\hbar^2} L \right)^{3/2} f^{3/2} - \delta(\vec{x}).$$

Как мы видим, в последнем уравнении фигурирует единственный безразмерный параметр. Отсюда мы можем заключить, что характерный размер атома в модели Томаса–Ферми

$$L \sim a_0 Z^{-1/3},$$

где  $a_0$  – боровский радиус,  $Z$  – заряд ядра атома.

**Примечание 1.** В ходе решения мы фактически предполагали, что в атоме существует свободный электронный газ, параметры которого плавно изменяются по мере удаления от ядра вместе с изменением электростатического потенциала. Также при записи уравнения Пуассона мы молчаливо предположили, что электроны создают некоторое непрерывное распределение заряда вокруг атома. Эти допущения

справедливы только в случае атома с большим количеством электронов. Любопытным является тот факт, что для таких атомов с ростом заряда наблюдается уменьшение радиуса, обусловленное увеличением кулоновского взаимодействия с ядром. Данный эффект действительно имеет место, если рассматривать отдельно взятые периоды таблицы Менделеева. Однако при переходе от одного периода к другому размеры атомов увеличиваются. Здесь отличие от результатов модели Томаса–Ферми продиктовано тем, что в ней не учтена оболочечная структура многоэлектронных атомов.

Что касается технической стороны расчёта, то самым малоочевидным ходом является проведение обезразмеривания  $f = \frac{L}{Ze} \varphi$  с множителем, в который входит заряд. Это сделано с целью приведения как левой части уравнения, так и неоднородности  $\delta(\vec{x})$  к виду, не зависящему от параметров задачи.

**Примечание 2.** На качественном уровне получить требуемый результат можно значительно проще.

Условие равновесия системы заключается в том, что градиент давления вырожденного электронного газа уравнивается кулоновской силой, действующей на единицу атомного объёма со стороны ядра:

$$\nabla p_e = (en_e)E,$$

здесь  $en_e$  – плотность электрического заряда в атоме,  $E$  – электрическое поле, создаваемое ядром. Оценивая  $\nabla p_e \sim p_e/R$ ,  $n_e \sim Z/R^3$ ,  $E \sim Ze/R^2$  ( $R$  – атомный размер) и используя результат решения задачи 9.1, получим

$$R \sim \frac{\hbar^2}{me^2} Z^{-1/3}.$$

**9.4(105).** Белый карлик – звезда, в которой давление вырожденного электронного газа уравнивает гравитационные силы. Полагая распределение плотности по радиусу звезды однородным, оценить равновесный размер такой системы. Массу звезды считать равной массе Солнца  $M = 2 \cdot 10^{33}$  г.

### Решение

Выберем фрагмент звездной материи, расположенный в телесном угле  $d\Omega$  относительно центра и имеющий толщину  $dr$ . Пусть  $\rho$  – его



плотность (по условию не зависящая от расстояния до центра). Тогда действующая на него гравитационная сила

$$df_{gr} = G \left( \frac{4}{3} \pi r^3 \rho \right) \frac{\rho r^2 d\Omega dr}{r^2}.$$

Здесь величина, стоящая в числителе дроби равна массе фрагмента, а стоящая в скобках – массе материи, его притягивающей,  $G$  – гравитационная постоянная. Согласно условию, эта сила уравновешивается гидростатической разностью давлений на поверхности фрагмента (силой Архимеда):

$$df_{hs} = -dP r^2 d\Omega.$$

Приравнивая по модулю эти две силы, найдём уравнение для давления вырожденного электронного газа в звезде:

$$\frac{dP}{dr} = -\frac{4\pi}{3} G \rho^2 r,$$

откуда

$$P = P_0 - \frac{2\pi}{3} G \rho^2 r^2.$$

Здесь за  $P_0$  обозначено давление в центре звезды. Так как на границе такой системы давление электронного газа должно обращаться в 0, можем связать величину  $P_0$  и её равновесный радиус  $R$  :

$$P_0 = \frac{2\pi}{3} G \rho^2 R^2.$$

Учитывая, что  $M = \frac{4}{3} \pi \rho R^3$ , запишем выражение для давления в центре звезды в виде

$$P_0 = \frac{2\pi}{3} \left( \frac{3}{4\pi} \right)^{2/3} G M^{2/3} \rho^{4/3}.$$

Звезда является электрически нейтральным объектом. Поэтому концентрация электронов в звезде равна концентрации протонов, т. е.  $\rho = m_p n$ , где  $m_p$  – масса протона,  $n$  – концентрация электронов (протонов).

Это давление сил гравитационного поля должно быть уравновешено давлением вырожденного электронного ферми-газа. Из термодинамики известно, что для идеального газа справедливо следующее соотношение

$$PV = \frac{2}{3} E,$$

где  $P$  – давление,  $V$  – объем, занимаемый газом,  $E$  – полная кинетическая энергия частиц газа. Это же соотношение справедливо и для идеального ферми-газа. Согласно промежуточному результату задачи 9.1,

$E = N\langle E \rangle = \frac{3}{5}N\varepsilon_F$ , здесь  $N$  – полное число электронов в звезде. Тогда

уравнение состояния газа запишется в виде

$$P = \frac{(3\pi^2)^{2/3}\hbar^2}{5m_e}n^{5/3},$$

т. е. давление вырожденного ферми-газа  $P \sim n^{5/3}$ . Как видно, давление вырожденного электронного ферми-газа  $P$  растет с ростом плотности звезды быстрее давления сил гравитации  $P_0$ , а значит в системе возможно наступление равновесия. Определим условие равновесия, приравнявая  $P = P_0$ . Получим

$$R \sim \frac{\hbar^2}{Gmm_p^{5/3}} \cdot M^{-1/3} \sim 10^9 \text{ см.}$$

Это даст численное значение, сравнимое с радиусом Земли. Отметим, что с увеличением массы белого карлика его радиус убывает.

**Примечание.** Полученный результат справедлив для нерелятивистских электронов. Значит, мы должны удостовериться, что энергия Ферми много меньше энергии покоя электронов.

Плотность материи в такой звезде  $n \approx 0.3 \cdot 10^{30} \text{ см}^{-3}$ , соответствующая ей энергия Ферми, вычисленная по нерелятивистской формуле, дает  $\varepsilon_F \approx 0.3 \text{ МэВ}$ . Такая энергия все ещё меньше энергии покоя электрона, но её величина говорит нам о том, что полученная оценка может иметь только качественный характер. Однако, имея в виду достаточно грубое предположение об однородности звезды, нельзя ожидать существенного улучшения результата от учёта точного релятивистского соотношения между энергией и импульсом электронов.

**9.5(106).** Оценить предельную массу звезды, удерживаемую давлением вырожденного ферми-газа протонов от гравитационного коллапса («предел Чандрасекара»).

### Решение

В предыдущей задаче была получена оценка на радиус звезды (белого карлика), размер которой определяется равенством давлений вырожденного электронного газа и сил гравитационного сжатия. Равновесие в белом карлике достигается, в конечном счете, в результате

того, что по мере гравитационного сжатия давление вырожденного ферми-газа возрастает быстрее, чем сжимающая сила. Казалось бы, с увеличением массы звезды ее размер будет неограниченно убывать, а плотность – наоборот, увеличиваться. В рассмотренной модели гравитационный коллапс невозможен. Аналогичная ситуация возникает и в случае вырожденного ферми-газа нуклонов.

Учтем, однако, что с ростом плотности вещества растёт и энергия Ферми, и при определенных условиях ферми-газ становится релятивистским. В результате меняется уравнение состояния вырожденного ферми-газа, что и приводит к возможности гравитационного коллапса.

Рассмотрим случай ультрарелятивистских частиц. Средняя энергия частиц тогда (так как  $E = \sqrt{m^2c^4 + p^2c^2} \approx pc$ ) определяется выражением

$$\langle E \rangle = \int_0^{p_F} \frac{4\pi p^2 \cdot 2 \cdot V}{N(2\pi\hbar)^3} pc dp = \frac{p_F^4 c V}{4\pi^2 \hbar^3 N} = \frac{3(3\pi^2)^{1/3}}{4} \hbar c n^{1/3}.$$

Для давления  $P$  ультрарелятивистского газа имеем  $P = \frac{1}{3} \langle E \rangle n$ , поэтому

$$P = \frac{(3\pi^2)^{1/3}}{4} \hbar c n^{4/3}.$$

Давление вырожденного газа растет по мере сжатия звезды по такому же закону, как и давление сил гравитации

$$P_0 = \frac{2\pi}{3} \left( \frac{3}{4\pi} \right)^{2/3} GM^{2/3} (nm_p)^{4/3}$$

(см. задачу 9.4). поэтому в случае, если в начальный момент  $P_0 > P$  давление вырожденного газа нуклонов не сможет остановить гравитационное сжатие звезды – наступит гравитационный коллапс. Условие коллапсирования звезды имеет вид:

$$M > M^* \sim (\hbar c / G)^{3/2} / m_p^2 \sim 3 \cdot 10^{33} \text{ г},$$

что по порядку величины соответствует массе Солнца. Таким образом, наша модель предсказывает, что массивные звезды должны быть неустойчивы относительно гравитационного притяжения.

**9.6(107).** Определить теплоёмкость разреженного газа, состоящего из двухатомных молекул. Молекулы считать гармоническими осцилляторами.

**Решение**

При расчёте теплоёмкости будем считать, что вращательные состояния и поступательное движение дают классический вклад в теплоёмкость. Мы же найдём добавку к теплоёмкости за счёт молекулярных колебаний. Теплоёмкость газа при постоянном объёме может быть найдена как производная энергии газа по температуре:

$$c_v = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T},$$

где  $N_A$  – число Авогадро,  $\langle E \rangle$  – средняя энергия молекулы. Для средней энергии справедливо соотношение:

$$\langle E \rangle = \left\langle \frac{mv^2}{2} \right\rangle + \langle E_{rot} \rangle + \langle E_{vib} \rangle.$$

Здесь  $m$  – масса молекулы,  $v$  – скорость поступательного движения. Первые два слагаемых – кинетические энергии поступательного и вращательного движения, учтём по классике. Вклад вращений в теплоёмкость можно учитывать в рамках классической теории в силу малости кванта вращательной энергии (это означает, что в широком диапазоне температур заселяется большое количество вращательных состояний, и при этом воспроизводится классический результат для теплоёмкости). Другими словами,

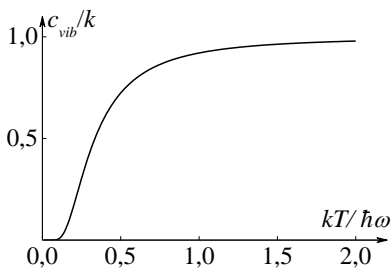
$$\frac{\partial}{\partial T} \left\langle \frac{mv^2}{2} \right\rangle = \frac{3}{2}k,$$

$$\frac{\partial \langle E_{rot} \rangle}{\partial T} = k,$$

$$c_v = \frac{5}{2}k + c_{vib},$$

$$c_{vib} \equiv \frac{\partial \langle E_{vib} \rangle}{\partial T},$$

где  $k$  – постоянная Больцмана. Для средней энергии квантового гармонического осциллятора в равновесном ансамбле справедливо соотношение



$$\langle E_{vib} \rangle = \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega}{\exp(\hbar\omega/kT) - 1}.$$

Тогда

$$c_{vib} = k \left( \frac{\hbar\omega}{kT} \right)^2 \frac{\exp(\hbar\omega/kT)}{(\exp(\hbar\omega/kT) - 1)^2}.$$

Интересно рассмотреть поведение колебательной части теплоёмкости при малых и больших значениях температуры. При  $T \rightarrow 0$  показатель экспоненты очень велик и в асимптотике имеем

$$c_{vib}|_{T \rightarrow 0} \sim k \left( \frac{\hbar\omega}{kT} \right)^2 \exp(-\hbar\omega/kT) \rightarrow 0.$$

При высоких значениях температуры показатель экспоненты мал, и она может быть разложена в ряд Тейлора по степеням аргумента:

$$c_{vib}|_{T \rightarrow \infty} \sim k \left( \frac{\hbar\omega}{kT} \right)^2 \frac{1 + \hbar\omega/kT}{(\hbar\omega/kT)^2} \rightarrow k.$$

В общем же виде зависимость колебательной части теплоёмкости от температуры выглядит так, как представлено на рисунке.

**9.7(108).** Теплоемкость молекулярного водорода  $H_2$  при температуре  $T = 1000$  К равна  $C_v = 2.7k$  ( $k$  – постоянная Больцмана). Определить теплоемкость молекулярного дейтерия  $D_2$  при той же температуре.

### Решение

При температуре, приведённой в условии, вращательную теплоёмкость и теплоёмкость, обусловленную поступательным движением, будем считать классической. Тогда добавка в  $0.2k$  обеспечена колебательным движением (см. предыдущую задачу)

$$c_{vibH} = k \left( \frac{\hbar\omega}{kT} \right)^2 \frac{\exp(\hbar\omega/kT)}{(\exp(\hbar\omega/kT) - 1)^2},$$

$$0.2 = \left( \frac{\hbar\omega}{kT} \right)^2 \frac{\exp(\hbar\omega/kT)}{(\exp(\hbar\omega/kT) - 1)^2}.$$

Здесь под  $\omega$  подразумевается частота колебаний молекулы водорода. Дейтерий при той же структуре обладает в два раза более тяжёлыми ядрами. Следовательно, частота колебаний ядер дейтерия  $\omega_D = \omega/\sqrt{2}$ , а соответствующая добавка к теплоёмкости

$$c_{vibD} = k \left( \frac{\hbar\omega}{2kT} \right)^2 \frac{\exp(\hbar\omega/\sqrt{2}kT)}{(\exp(\hbar\omega/\sqrt{2}kT) - 1)^2},$$

т. е. равна колебательной теплоёмкости водорода при  $T = 1414$  К. Непосредственно найти это значение можно, найдя отношение частоты колебаний молекулы водорода к температуре, заданной в условии по добавке к теплоёмкости. Получить численный результат можно,

например, с помощью графика, приведённого в решении предыдущей задачи. По нему видно, что при данных условиях  $kT/\hbar\omega \approx 0.2$ . Тогда  $\sqrt{2}kT/\hbar\omega \approx 0.28$ , а колебательная теплоёмкость дейтерия  $c_{vibD} \approx 0.4k$ . Отсюда следует ответ

$$c_D \approx 2.9k.$$

**9.8(109).** Рассматривая атомный электрон как квантовый осциллятор с частотой  $\omega_0$ , показать, что на больших расстояниях между атомами  $R \gg a_0$  ( $a_0$  – характерная амплитуда колебаний электрона) возникают силы притяжения, описываемые потенциалом  $V(R) \sim -1/R^6$  (силы Ван-дер-Ваальса).

### Решение

На большом расстоянии друг от друга основной вклад во взаимодействие осцилляторов даёт наличие у них дипольного момента. Запишем гамильтониан системы из двух осцилляторов с учетом диполь-дипольного взаимодействия:

$$\hat{H} = \frac{m\omega_0^2}{2} r_1^2 + \frac{m\omega_0^2}{2} r_2^2 + \frac{\hat{p}_1^2}{2m} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m} + \frac{(\vec{d}_1, \vec{d}_2) - 3(\vec{n}, \vec{d}_1)(\vec{n}, \vec{d}_2)}{R^3}.$$

Здесь за  $r_{1,2}$  обозначены смещения частиц относительно положений равновесия,  $R$  – расстояние между осцилляторами (будем полагать  $R \gg r_i$ , т. е. смещением диполей от начального положения пренебрежём),  $\vec{n}$  – единичный вектор, направленный от одного диполя к другому. Направим ось  $Ox$  по вектору  $\vec{n}$ , а отсчитывать координаты частиц будем от положений равновесия. Тогда

$$\hat{H} = \frac{m\omega_0^2}{2} (x_1^2 + y_1^2 + z_1^2 + x_2^2 + y_2^2 + z_2^2) + \frac{\hat{p}_1^2}{2m} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m} + \frac{e^2}{R^3} (-2x_1x_2 + y_1y_2 + z_1z_2).$$

Мы получили гамильтониан системы связанных осцилляторов (см. также задачу 3.23). Осталось определить зависимость энергии основного состояния системы от расстояния  $R$ . Для этого введем нормальные координаты системы:

$$X_{\pm} = \frac{x_1 \pm x_2}{\sqrt{2}},$$

$$Y_{\pm} = \frac{y_1 \pm y_2}{\sqrt{2}},$$

$$Z_{\pm} = \frac{z_1 \pm z_2}{\sqrt{2}}.$$

В таких координатах гамильтониан примет удобный вид:

$$\hat{H} = \frac{m\Omega_{1-}^2}{2} X_+^2 + \frac{m\Omega_{1+}^2}{2} X_-^2 + \frac{m\Omega_{2+}^2}{2} (Y_+ + Z_+)^2 + \frac{m\Omega_{2-}^2}{2} (Y_- + Z_-)^2 + \frac{\hat{p}_+^2}{2m} + \frac{\hat{p}_-^2}{2m}.$$

Здесь  $\hat{p}_{\pm}^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial X_{\pm}^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y_{\pm}^2} + \frac{\partial^2}{\partial Z_{\pm}^2} \right)$ , а частоты  $\Omega_{i\pm}$  заданы соотношениями:

$$\Omega_{1\pm} = \sqrt{\omega_0^2 \pm \frac{2e^2}{mR^3}},$$

$$\Omega_{2\pm} = \sqrt{\omega_0^2 \pm \frac{e^2}{mR^3}}.$$

В таких координатах гамильтониан описывает шесть несвязанных осцилляторов с различными частотами. Энергия основного состояния такой системы

$$E_0 = \frac{\hbar}{2} (\Omega_{1-} + \Omega_{1+} + 2\Omega_{2-} + 2\Omega_{2+}).$$

Разложив выражения для частот в ряд Тейлора по параметру  $\frac{e^2}{m\omega_0^2 R^3}$  до

второго порядка, получим следующую асимптотику энергии основного состояния при больших  $R$ :

$$E_0 = 3\hbar\omega_0 - \frac{3\hbar e^4}{4m^2\omega_0^4 R^6}.$$

Отсюда видно, что энергия основного состояния системы зависит от расстояния между частицами в асимптотике как  $V = \text{const} - \frac{A}{R^6}$ . Силы,

возникающие в результате действия такого потенциала, называют силами Ван-дер-Ваальса. Наличие таких сил с точки зрения квантовой механики обусловлено наличием нулевых колебаний осциллятора или невозможностью локализации частицы в точке.

**Примечание.** Результат этой задачи может быть получен не только для гармонического осциллятора, но и для других видов потенциальной ямы. В случае произвольного потенциала получение асимптотики возможно с помощью второго порядка теории возмущений. Во втором порядке теории возмущений диполь-дипольное взаимодействие приведёт к такой же зависимости энергии от расстояния  $-\frac{1}{R^6}$ .

**9.10(110).** Определить диэлектрическую восприимчивость среды разрежённого газа с плотностью атомов  $N$  в высокочастотном электромагнитном поле с частотой  $\omega$ , близкой к частоте атомного перехода  $\omega \approx \omega_0$ . Считать атомы среды гармоническими осцилляторами с частотой  $\omega_0$ .

### Решение

Будем считать, что атомы среды практически не взаимодействуют друг с другом. Тогда нестационарное уравнение Шрёдингера для отдельного атома среды будет выглядеть следующим образом:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \hat{H}\psi(x, t) + \hat{V}\psi(x, t).$$

Здесь под  $\hat{H}$  подразумевается гамильтониан свободного атома, а  $\hat{V}$  — оператор взаимодействия электрона с внешним полем. Данное уравнение без существенных ограничений на форму потенциала может быть решено с помощью нестационарной теории возмущений в предположении, что величина электрического поля в электромагнитной волне много меньше внутриатомной напряженности. Представим волновую функцию системы в виде суммы по собственным состояниям  $\phi_n(x)$  атомного гамильтониана  $\hat{H}$ :

$$\psi(x, t) = \sum_{m=0}^{\infty} C_m(t) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_m t\right) \phi_m(x).$$

Подставим данное разложение в исходное уравнение:

$$\sum_{m=0}^{\infty} i\hbar \dot{C}_m(t) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_m t\right) \phi_m(x) = \sum_{m=0}^{\infty} C_m(t) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_m t\right) \hat{V} \phi_m(x).$$

Домножив правую и левую части на  $\phi_n^*(x)$  и проинтегрировав по координате (с учетом ортогональности собственных функций гамильтониана), получим систему уравнений на коэффициенты разложения  $C_n(t)$ .



$$\dot{C}_n = \frac{1}{i\hbar} \sum_{m=0}^{\infty} C_m \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(E_m - E_n)t\right) V_{nm}(t),$$

где введено следующее обозначение для матричных элементов оператора возмущения  $V_{nm} = \langle \phi_n | \hat{V} | \phi_m \rangle$ . До сих пор нами не было сделано ни допущений о форме потенциала, ни о характере взаимодействия, ни об их относительных значениях. Таким образом, записанная система является точной. Полагая теперь, что взаимодействие с полем является не слишком сильным, будем искать решение этой системы методом итераций. Представим коэффициенты  $C_n$  в виде суммы

$$C_n = C_n^{(0)} + C_n^{(1)} + \dots,$$

в которой каждое следующее слагаемое меньше предыдущего, а  $C_n^{(0)}$  соответствуют начальным условиям. Считая, что в начальный момент времени заселено только невозбуждённое состояние ( $C_0^{(0)} = 1$ ) и приравнявая в обеих частях члены первого порядка малости, получим выражения для  $C_n^{(1)}$ :

$$\begin{aligned} \dot{C}_n^{(1)} &= \frac{1}{i\hbar} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(E_n - E_0)t\right) V_{n0}(t), \\ C_n^{(1)} &= \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(E_n - E_0)t'\right) V_{n0}(t') dt'. \end{aligned}$$

Найдём теперь значение дипольного момента атома, учитывая, что в основном состоянии среднее значение координаты равно нулю.

$$\begin{aligned} \langle d \rangle &= \langle \psi(t) | ex | \psi(t) \rangle = \sum_{n,m=0}^{\infty} C_m^* C_n e \langle \phi_m | x | \phi_n \rangle \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(E_n - E_m)t\right), \\ \langle d^{(1)} \rangle &= e \sum_{n=0}^{\infty} 2 \operatorname{Re} \left( C_n^{(1)} \langle \phi_0 | x | \phi_n \rangle \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(E_n - E_0)t\right) \right). \end{aligned}$$

Конкретизируем теперь вид потенциала и вид взаимодействия. Рассмотрим задачу в электрическом дипольном приближении. Энергия взаимодействия с внешним полем примет вид

$$\hat{V}(t) = -eE(t)x,$$

Конкретное выражение для атомного потенциала определит необходимые матричные элементы. Согласно условию речь идёт о состояниях гармонического осциллятора. В нем будет отличен от нуля только матричный элемент оператора координаты, связывающий основное и первое возбуждённое состояние:

$$\langle \phi_0 | x | \phi_1 \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}}.$$

Подставив в выражение для  $C_n^{(1)}$  выражение для оператора взаимодействия и воспользовавшись найденными значениями матричных элементов оператора координаты, получим следующее выражение для дипольного момента системы:

$$\langle d^{(1)} \rangle = \frac{e^2}{m\omega_0} \int_{-\infty}^t \sin(\omega_0(t'-t)) E(t') dt'.$$

Рассмотрим действие на среду монохроматического поля. Для вычисления интеграла воспользуемся следующим приёмом: запишем поле в виде  $E(t) = E_0 \exp(\lambda t) \cos \omega t$  и устремим  $\lambda$  к 0. Физически это соответствует адиабатически медленному включению поля. Таким способом мы избегаем появления собственных колебаний осциллятора и рассматриваем только вынужденную часть.

$$\langle d^{(1)} \rangle = \frac{e^2}{m(\omega_0^2 - \omega^2)} E_0 \cos \omega t.$$

Тогда для поляризации среды, как для дипольного момента единицы объёма, можно записать

$$P = \frac{Ne^2}{m(\omega_0^2 - \omega^2)} E_0 \cos \omega t,$$

а диэлектрическая восприимчивость такой среды

$$\chi(\omega) = \frac{Ne^2}{m(\omega_0^2 - \omega^2)}.$$

Отметим, что полученный ответ носит на самом деле предельно общий характер, а предположением о том, что атомы являются гармоническими осцилляторами, мы воспользовались лишь при вычислении матричного элемента оператора координаты.

**Примечание.** Если с самого начала предполагать, что атомы среды являются гармоническими осцилляторами, то задачу можно решить проще. В задаче 3.15 было показано, что для среднего значения координаты квантового осциллятора справедливо классическое уравнение движения:

$$\frac{d^2 \langle \bar{x} \rangle}{dt^2} + \omega_0^2 \langle \bar{x} \rangle = eE(t).$$

Так как оператор дипольного момента пропорционален координате, для поляризационного отклика среды на внешнее электрическое поле

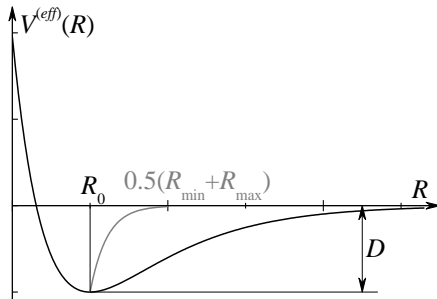
получим полностью совпадающий с классическим результат (который является следствием электронной теории дисперсии Лоренца).

Как уже отмечалось, способ, приведённый в основной части решения, применим практически для любой квантовомеханической системы. Отличаться будут лишь матричные элементы оператора дипольного момента (координаты). Данное обстоятельство влияет только на абсолютное значение диэлектрической восприимчивости, в то время как ход частотной зависимости останется прежним. Этим обстоятельством и объясняется успех классической электронной теории дисперсии. В то же время, следует обратить внимание на то, что представление об атоме, как о гармоническом осцилляторе оказывается справедливым лишь в относительно слабых полях в условиях применимости первого порядка нестационарной теории возмущений.

**9.10(111).** В твёрдом теле потенциальная энергия межатомного взаимодействия в зависимости от расстояния между атомами  $R$  определяется выражением  $V(R) = D(1 - \exp(-\alpha(R - R_0)))^2$ . Определить коэффициент теплового линейного расширения твёрдого тела. Сделать численную оценку при  $D = 4$  эВ,  $R_0 = 2$  Å,  $\alpha = 10^7$  см<sup>-1</sup>.

**Решение**

В твёрдом теле эффект расширения при нагревании связан с увеличением среднего (равновесного) расстояния между атомами в процессе увеличения энергии колебательного возбуждения с увеличением температуры (см. рис.), что обусловлено асимметрией формы потенциальной кривой. Считая колебания малыми, разложим потенциал взаимодействия в ряд по малому параметру  $\xi = \alpha(R - R_0) \ll 1$  вблизи положения равновесия:



$$V(R) \cong D\alpha^2(R - R_0)^2(1 - \alpha(R - R_0)).$$

Считая, что энергия осциллятора равна  $kT$ , найдем диапазон изменений межатомного расстояния из соотношения  $V(R) = kT$  или

$$\xi^2(1 - \xi) = kT/D.$$

Приближенное решение этого уравнения имеет вид

$$\xi_{\max} = \alpha(R_{\max} - R_0) = \sqrt{\frac{kT}{D}} \left( 1 + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{kT}{D}} \right),$$

$$\xi_{\min} = \alpha(R_{\min} - R_0) = -\sqrt{\frac{kT}{D}} \left( 1 - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{kT}{D}} \right).$$

Для среднего значения межатомного расстояния получим

$$R^* = (R_{\min} + R_{\max})/2 = R_0 + \frac{kT}{2\alpha D}.$$

Тогда относительное увеличение межъядерного расстояния определяется соотношением

$$\frac{\Delta R}{R_0} = \frac{R^* - R_0}{R_0} = \gamma T,$$

где  $\gamma = \frac{k}{2\alpha R D} \approx 10^{-4}$  град<sup>-1</sup> – линейный коэффициент расширения.

# Справочные данные

## Основные физические постоянные

Скорость света в вакууме	$c = 2.998 \cdot 10^{10}$ см/с
Гравитационная постоянная	$G = 6.67 \cdot 10^{-8}$ см <sup>3</sup> /г с <sup>2</sup>
Постоянная Больцмана	$k = 1.381 \cdot 10^{-16}$ эрг/град
Заряд электрона	$e = 4.803 \cdot 10^{-10}$ абс. ед.
Масса электрона	$m = 0.911 \cdot 10^{-27}$ г
Энергия покоя электрона	$mc^2 = 0.511$ МэВ
Масса протона	$M = 1.673 \cdot 10^{-24}$ г
Энергия покоя протона	$Mc^2 = 938.28$ МэВ
Отношение масс протона и электрона	$M/m = 1836.15$
Объемная постоянная Стефана–Больцмана	$\alpha = 7.57 \cdot 10^{-15}$ эрг/(см <sup>3</sup> град <sup>4</sup> )
Поверхностная постоянная Стефана–Больцмана	$\sigma = 5.67 \cdot 10^{-5}$ эрг/(с.см <sup>2</sup> .град <sup>4</sup> )
Постоянная Планка	$\hbar = 1.0546 \cdot 10^{-27}$ эрг.с $h = 6.626 \cdot 10^{-27}$ эрг.с
Постоянная Ридберга (для бесконечной массы ядра)	$R = 109737$ см <sup>-1</sup>
Постоянная Ридберга (для атома водорода)	$R_H = 109677$ см <sup>-1</sup>
Ридберг	$Ry = me^4/2\hbar^2 = 13.606$ эВ
Боровский радиус	$a_0 = \hbar^2/me^2 = 0.529 \cdot 10^{-8}$ см
Классический радиус электрона	$r_e = e^2/mc^2 = 2.82 \cdot 10^{-13}$ см
Комптоновская длина волны электрона	$\Lambda_e = 2\pi\hbar/mc = 2.426 \cdot 10^{-10}$ см
Постоянная тонкой структуры	$\alpha = e^2/\hbar c = 1/137.036$
Магнетон Бора	$\mu_0 = e\hbar/2mc = 0.927 \cdot 10^{-20}$ эрг/Гс
Ядерный магнетон	$\mu_N = e\hbar/2Mc = 5.051 \cdot 10^{-24}$ эрг/Гс

**Соотношение между спектральными и энергетическими единицами**

Единица измерения	$\tilde{\nu}$ , см <sup>-1</sup>	$\lambda$ , см	$E$ , эрг	$E$ , эВ
1 см <sup>-1</sup>	—	1	$1.9864 \cdot 10^{-16}$	$1.2398 \cdot 10^{-4}$
1 эрг	$5.0341 \cdot 10^{15}$	$1.9864 \cdot 10^{-16}$	—	$6.2415 \cdot 10^{11}$
1 эВ	8065.54	$1.2398 \cdot 10^{-4}$	$1.6022 \cdot 10^{-12}$	—

**Приставки для обозначения кратных и дольных единиц измерения**

приставка	Числовое значение	Обозначение (русское)	Обозначение (международное)
zepto	$10^{-21}$	з	z
atto	$10^{-18}$	а	a
femto	$10^{-15}$	ф	f
pico	$10^{-12}$	п	p
nano	$10^{-9}$	н	n
micro	$10^{-6}$	мк	$\mu$
milli	$10^{-3}$	м	m
centi	$10^{-2}$	с	c
deci	$10^{-1}$	д	d
kilo	$10^3$	к	k
mega	$10^6$	М	M
giga	$10^9$	Г	G
tera	$10^{12}$	Т	T
peeta	$10^{15}$	П	P

**Некоторые интегралы**

$$1. \int_0^{\infty} \frac{x^n dx}{e^x - 1} = \begin{cases} \pi^2/6, & n = 1, \\ 2.405, & n = 2, \\ \pi^4/15, & n = 3, \\ 24.9, & n = 4. \end{cases}$$

$$2. \int_0^{\infty} x^n \exp(-x) dx = n!, \quad n > 0 \text{ - целое.}$$

3. Интеграл Пуассона  $\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-x^2) dx = \sqrt{\pi}$ .

4. Г-функция Эйлера  $\Gamma(p) = \int_0^{\infty} x^{p-1} e^{-x} dx$ .

$$\Gamma(p+1) = p\Gamma(p), \quad \Gamma(2) = \Gamma(1) = 1, \quad \Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}.$$

### Полиномы Эрмита

1. Общее выражение для полиномов Эрмита:

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} \left( e^{-x^2} \right).$$

В частности,  $H_0(x) = 1$ ,  $H_1(x) = 2x$ ,  $H_2(x) = 4x^2 - 2$ ,  $H_3(x) = 8x^3 - 12x$ .

Полиномы Эрмита  $H_n(x)$  являются решениями уравнения Эрмита

$$\frac{d^2 u}{dx^2} - 2x \frac{du}{dx} + 2nu = 0$$

и могут быть представлены в виде

$$H_n(x) = n! \sum_{m=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} \frac{(-1)^m}{m!(n-2m)!} (2x)^{n-2m}.$$

2. Нормировка и ортогональность

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_m(x) H_n(x) \exp(-x^2) dx = 2^n n! \sqrt{\pi} \delta_{mn}.$$

3. Рекуррентные соотношения для полиномов Эрмита

$$xH_n(x) = nH_{n-1}(x) + \frac{1}{2}H_{n+1}(x), \quad \frac{dH_n(x)}{dx} = 2nH_{n-1}(x).$$

4. Экспоненциальная производящая функция

$$\exp(2xt - t^2) = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) \frac{t^n}{n!}.$$

5. Асимптотическое поведение при больших значениях  $n$  :

$$e^{-x^2/2} H_n(x) \sim \frac{2^n}{\sqrt{\pi}} \Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right) \cos\left(x\sqrt{2n} - n\frac{\pi}{2}\right).$$

6. Полиномы Эрмита как собственные функции преобразования Фурье:

$$F\{\exp(-x^2/2)H_n(x)\} = i^n \exp(-k^2/2)H_n(k),$$

$$\text{где } F\{f(x)\} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(ikx) f(x) dx.$$

### Полиномы Лежандра

1. Общее выражение для полиномов Лежандра

$$P_\ell(x) = \frac{1}{2^\ell \ell!} \frac{d^\ell}{dx^\ell} (x^2 - 1)^\ell.$$

Присоединённые полиномы Лежандра определяются как

$$P_\ell^{(m)}(x) = (1-x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} P_\ell(x), \quad (m > 0),$$

$$P_\ell^{(m)}(x) = \frac{1}{2^\ell \ell!} (1-x^2)^{m/2} \frac{d^{\ell-m}}{dx^{\ell-m}} (x^2 - 1)^\ell.$$

Присоединённые полиномы Лежандра  $P_\ell^{(m)}(x)$  являются решениями уравнения Лежандра:

$$(1-x^2) \frac{d^2 u}{dx^2} - 2x \frac{du}{dx} + \left( \ell(\ell+1) - \frac{m^2}{1-x^2} \right) u = 0.$$

2. Ортогональность

$$\int_{-1}^1 P_\ell^{(m)}(x) P_k^{(m)}(x) dx = \frac{2(\ell+m)!}{(2\ell+1)(\ell-m)!} \delta_{k,\ell}.$$

3. Рекуррентное соотношение для полиномов Лежандра

$$x P_\ell^{(m)}(x) = \frac{\ell-m+1}{2\ell+1} P_{\ell+1}^{(m)}(x) + \frac{\ell+m}{2\ell+1} P_{\ell-1}^{(m)}(x).$$

### Сферические функции (сферические гармоники)

1. Определение:

$$Y_{\ell m}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{(2\ell+1)(\ell-|m|)!}{4\pi(\ell+|m|)!}} P_\ell^{(|m|)}(\cos\theta) e^{im\varphi}.$$



Сферические гармоники – собственные функции угловой части оператора Лапласа  $\Delta_{\theta\varphi}$ :

$$\Delta_{\theta\varphi} Y_{\ell m}(\theta, \varphi) = -\ell(\ell + 1) Y_{\ell m}(\theta, \varphi).$$

2. Ортонормированность:

$$\int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi Y_{\ell m}(\theta, \varphi) Y_{\ell' m'}^*(\theta, \varphi) = \delta_{\ell, \ell'} \delta_{m, m'}.$$

3. Теорема сложения

Если  $\vec{x}$  и  $\vec{y}$  – два единичных вектора, задаваемых в сферической системе координат направлениями  $(\theta_1, \varphi_1)$  и  $(\theta_2, \varphi_2)$ , то

$$P_\ell(\vec{x} \cdot \vec{y}) = \frac{4\pi}{2\ell + 1} \sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_{\ell m}^*(\theta_1, \varphi_1) Y_{\ell m}(\theta_2, \varphi_2),$$

где  $P_\ell(\vec{x} \cdot \vec{y})$  – полином Лежандра степени  $\ell$ .

4. Разложение  $\frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$  по сферическим функциям:

$$\frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} = \begin{cases} \frac{4\pi}{r_1} \sum_{\ell m} \frac{1}{2\ell + 1} \left(\frac{r_2}{r_1}\right)^\ell Y_{\ell m}^*(\theta_1, \varphi_1) Y_{\ell m}(\theta_2, \varphi_2), & r_1 > r_2, \\ \frac{4\pi}{r_2} \sum_{\ell m} \frac{1}{2\ell + 1} \left(\frac{r_1}{r_2}\right)^\ell Y_{\ell m}^*(\theta_1, \varphi_1) Y_{\ell m}(\theta_2, \varphi_2), & r_1 < r_2. \end{cases}$$

Здесь  $(\theta_1, \varphi_1)$  и  $(\theta_2, \varphi_2)$  – полярный и азимутальный углы векторов  $\vec{r}_1$  и  $\vec{r}_2$ .

5. Разложение плоской волны по сферическим функциям:

$$\exp(i\vec{k}\vec{r}) = 4\pi \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} i^\ell j_\ell(kr) Y_{\ell m}^*(\theta_k, \varphi_k) Y_{\ell m}(\theta, \varphi),$$

где  $\theta_k, \varphi_k$  и  $\theta, \varphi$  – углы, задающие ориентацию векторов  $\vec{k}$  и  $\vec{r}$  в пространстве,  $j_\ell(\xi)$  – сферическая функция Бесселя.

Явные выражения для нескольких сферических функций:

$$Y_{00}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{1}{4\pi}};$$

$$Y_{10}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos(\theta), \quad Y_{1,\pm 1}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin(\theta) e^{\pm i\varphi},$$

$$Y_{2,0}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \left( \frac{1}{2} (3\cos^2(\theta) - 1) \right), \quad Y_{2,\pm 1}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{5}{24\pi}} \sin(\theta) \cos(\theta) e^{\pm i\varphi},$$

$$Y_{2,\pm 2}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{48\pi}} \sin^2(\theta) e^{\pm 2i\varphi}.$$

### Функции Бесселя

1. Определения.

*Функция Бесселя:*

$$J_{\alpha}(x) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m! \Gamma(m + \alpha + 1)} \left( \frac{x}{2} \right)^{2m + \alpha},$$

$\alpha$  – порядок функции Бесселя.

Функции Бесселя являются решениями уравнения Бесселя

$$x^2 \frac{d^2 u}{dx^2} + x \frac{du}{dx} + (x^2 - \alpha^2) u = 0.$$

*Функция Неймана* (функция Бесселя второго рода):

$$Y_{\alpha} = \frac{J_{\alpha}(x) \cos(\alpha\pi) - J_{-\alpha}(x)}{\sin(\alpha\pi)}.$$

В случае целого  $\alpha$  выражение следует понимать как предел по  $\alpha$ .

*Функция Инфельда* (модифицированная функция Бесселя первого рода):

$$I_{\alpha} = i^{-\alpha} J_{\alpha}(ix).$$

*Функция Макдональда* (модифицированная функция Бесселя второго рода):

$$K_{\alpha} = \frac{\pi}{2} \frac{I_{-\alpha}(x) - I_{\alpha}(x)}{\sin(\alpha\pi)}.$$

В случае целого  $\alpha$  выражение следует понимать как предел по  $\alpha$ .

2. Интегральные представления функций Бесселя:

$$J_{\alpha}(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} \cos(\alpha\tau - x \sin \tau) d\tau,$$

$$K_{\alpha}(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \exp(-x \operatorname{ch} \tau) \operatorname{ch}(\alpha\tau) d\tau.$$

3. Асимптотическое поведение.

а) Малые значения аргумента при неотрицательных значениях порядка,

$$0 < x \ll \sqrt{\alpha+1}:$$

$$J_{\alpha}(x) \approx \frac{1}{\Gamma(\alpha+1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{\alpha},$$

$$K_{\alpha}(x) \approx \begin{cases} \frac{2}{\pi} (\ln(x/2) + \gamma), & \alpha = 0, \\ -\frac{\Gamma(\alpha)}{\pi} \left(\frac{2}{x}\right)^{\alpha}, & \alpha > 0. \end{cases}$$

б) Большие значения аргумента,  $x \gg |\alpha^2 - 1/4|$ :

$$J_{\alpha}(x) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \cos\left(x - \frac{\alpha\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right),$$

$$K_{\alpha}(x) \approx \sqrt{\frac{\pi}{2x}} e^{-x}.$$

4. Формулы Якоби–Ангера

$$\exp(iz \cos \phi) \approx \sum_{n=-\infty}^{\infty} i^n J_n(z) \exp(in\phi),$$

5. Теорема сложения

$$J_n(z_1 + z_2) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} J_k(z_1) J_{n-k}(z_2).$$

6. Сферические функции Бесселя:

$$j_n(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} J_{n+1/2}(x),$$

$$y_n(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} Y_{n+1/2}(x).$$

Сферические функции Бесселя  $j_n(x)$  являются радиальными частями решений уравнения Гельмгольца для шара:

$$x^2 \frac{d^2 u}{dx^2} + 2x \frac{du}{dx} + (x^2 - n(n+1))u = 0.$$

$$j_n(x) = (-x)^n \left( \frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^n \frac{\sin x}{x},$$

$$n_n(x) = -(-x)^n \left( \frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^n \frac{\cos x}{x}.$$

В частности

$$j_0(x) = \frac{\sin(x)}{x}, \quad j_1(x) = \frac{\sin(x)}{x^2} - \frac{\cos(x)}{x}$$

$$n_0(x) = -\frac{\cos(x)}{x}, \quad n_1(x) = -\frac{\cos(x)}{x^2} - \frac{\sin(x)}{x}$$

### Оператор Лапласа

1. В декартовых координатах

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

2. В цилиндрических координатах

$$\nabla^2 \psi = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2}.$$

3. В сферических координатах

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

### Волновые функции стационарных состояний водородоподобного иона

1. Общий вид:

$$\psi_{n,\ell,m}(r, \theta, \varphi) = R_{n\ell}(r) Y_{\ell m}(\theta, \varphi),$$

где  $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$  - сферические функции,

$R_{n\ell}(r)$  - радиальные части волновых функций.

$$R_{n\ell}(r) = -\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{2}{n^2} \sqrt{\frac{(n-\ell-1)!}{((n+\ell)\ell)^3}} e^{-Zr/a_0} \left(\frac{2Zr}{na_0}\right)^\ell L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(2Zr/a_0),$$

$L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(x)$  – обобщённые полиномы Лагерра, определяемые как

$$L_s^q(x) = e^x x^{-q} \frac{d^s}{dx^s} (x^{q+s} e^{-x}),$$

$Z$  – заряд ядра атома,

$a_0$  – боровский радиус.

2. Выписанные в таком виде, радиальные части волновых функций подчинены условию нормировки

$$\int_0^{+\infty} |R_{n\ell}(r)|^2 r^2 dr = 1.$$

3. Несколько первых радиальных частей волновых функций водородоподобного иона:

$$R_{10}(r) = 2(Z/a_0)^{3/2} \exp(-Zr/a_0),$$

$$R_{20}(r) = 2(Z/2a_0)^{3/2} (1 - Zr/2a_0) \exp(-Zr/2a_0),$$

$$R_{21}(r) = \frac{2}{\sqrt{3}} (Z/2a_0)^{3/2} Zr/2a_0 \exp(-Zr/2a_0),$$

$$R_{30}(r) = 2(Z/3a_0)^{3/2} \left(1 - \frac{2}{3} Zr/a_0 + \frac{2}{27} (Zr/a_0)^2\right) \exp(-Zr/3a_0),$$

$$R_{31}(r) = \frac{4\sqrt{2}}{9} (Z/3a_0)^{3/2} (Zr/a_0) \left(1 - \frac{1}{6} Zr/a_0\right) \exp(-Zr/3a_0),$$

$$R_{32}(r) = \frac{4}{27\sqrt{10}} (Z/3a_0)^{3/2} (Zr/a_0)^2 \exp(-Zr/3a_0).$$

**Атомные массы, размеры, потенциалы ионизации,  
спектроскопические характеристики элементов  
периодической системы**

Атом- ный номер	Элемент	Сим- вол	Атомна я масса	Электрон ная конфи- гурация	Осно- вной терм	Средни й радиус, ед. $a_0$	Потенциалы ионизации, эВ	
							I	II
1	Водород	H	1.008	1s	$^2S$	1.5	13.599	-
2	Гелий	He	4.003	1s <sup>2</sup>	$^1S$	0.927	24.588	54.418
3	Литий	Li	6.940	2s	$^2S$	3.874	5.392	75.641
4	Бериллий	Be	9.013	2s <sup>2</sup>	$^1S$	2.649	9.323	18.211
5	Бор	B	10.81	2p	$^2P$	2.205	8.298	25.155
6	Углерод	C	12.011	2p <sup>2</sup>	$^3P$	1.743	11.260	24.384
7	Азот	N	14.007	2p <sup>3</sup>	$^4S$	1.447	14.534	29.602
8	Кислород	O	16.00	2p <sup>4</sup>	$^3P$	1.239	13.618	35.118
9	Фтор	F	19.00	2p <sup>5</sup>	$^2P$	1.085	17.423	34.971
10	Неон	Ne	20.179	2p <sup>6</sup>	$^1S$	0.965	21.565	40.964
11	Натрий	Na	22.990	3s	$^2S$	4.209	5.139	47.287
12	Магний	Mg	24.305	3s <sup>2</sup>	$^1S$	3.253	7.646	15.035
13	Алюминий	Al	26.98	3p	$^2P$	3.434	5.986	18.829
14	Кремний	Si	28.09	3p <sup>2</sup>	$^3P$	2.788	8.152	16.346
15	Фосфор	P	30.974	3p <sup>3</sup>	$^4S$	2.369	10.487	19.726
16	Сера	S	32.06	3p <sup>4</sup>	$^3P$	2.069	10.360	23.338
17	Хлор	Cl	35.453	3p <sup>5</sup>	$^2P$	1.842	12.968	23.814
18	Аргон	Ar	39.948	3p <sup>6</sup>	$^1S$	1.663	15.760	27.630
19	Калий	K	39.10	4s	$^2S$	5.244	4.341	31.626
20	Кальций	Ca	40.08	4s <sup>2</sup>	$^1S$	4.218	6.113	11.872
21	Скандий	Sc	44.96	3d4s <sup>2</sup>	$^2D$	3.96	6.562	12.800
22	Титан	Ti	47.90	3d <sup>2</sup> 4s <sup>2</sup>	$^3F$	3.766	6.74	13.58
23	Ванадий	V	50.94	3d <sup>3</sup> 4s <sup>2</sup>	$^4F$	3.607	6.74	14.66
24	Хром	Cr	51.996	3d <sup>5</sup> 4s	$^7S$	3.843	6.767	16.498
25	Марганец	Mn	54.94	3d <sup>5</sup> 4s <sup>2</sup>	$^6S$	3.349	7.434	15.640
26	Железо	Fe	55.85	3d <sup>6</sup> 4s <sup>2</sup>	$^5D$	3.242	7.870	16.188
27	Кобальт	Co	58.93	3d <sup>7</sup> 4s <sup>2</sup>	$^4F$	3.144	7.864	17.083
28	Никель	Ni	58.70	3d <sup>8</sup> 4s <sup>2</sup>	$^3F$	3.055	7.637	18.169

Атомный номер	Элемент	Символ	Атомная масса	Электронная конфигурация	Основной терм	Средний радиус, ед. $a_0$	Потенциалы ионизации, эВ	
							I	II
29	Медь	Cu	63.55	$3d^{10}4s$	$^2S$	3.331	7.726	20.292
30	Цинк	Zn	65.38	$3d^{10}4s^2$	$^1S$	2.898	9.394	17.965
31	Галлий	Ga	69.72	$4s^24p$	$^2P$	3.424	5.999	20.515
32	Германий	Ge	72.59	$4s^24p^2$	$^3P$	2.904	7.899	15.934
33	Мышьяк	As	74.92	$4s^24p^3$	$^4S$	2.561	9.789	18.589
34	Селен	Se	78.96	$4s^24p^4$	$^3P$	2.309	9.752	21.16
35	Бром	Br	79.904	$4s^24p^5$	$^2P$	2.112	11.814	21.81
36	Криптон	Kr	83.80	$4s^24p^6$	$^1S$	1.952	14.000	24.359
37	Рубидий	Rb	85.47	$5s$	$^2S$	5.632	4.177	27.28
38	Стронций	Sr	87.62	$5s^2$	$^1S$	4.633	5.695	11.030
39	Иттрий	Y	88.91	$4d5s^2$	$^2D$	4.300	6.217	12.24
40	Цирконий	Zr	91.22	$4d^25s^2$	$^3F$	4.078	6.634	13.13
41	Ниобий	Nb	92.91	$4d^45s$	$^6D$	4.207	6.759	14.32
42	Молибден	Mo	95.94	$4d^55s$	$^7S$	4.079	7.092	16.16
43	Технеций	Tc	[98]	$4d^55s^2$	$^6S$	3.650	7.28	15.26
44	Рутений	Ru	101.1	$4d^75s$	$^5F$	3.877	7.366	16.76
45	Родий	Ro	102.91	$4d^85s$	$^4F$	3.795	7.46	18.08
46	Палладий	Pd	106.4	$4d^{10}$	$^1S$	1.533	8.336	19.43
47	Серебро	Ag	107.88	$4d^{10}5s$	$^2S$	3.656	7.576	21.484
48	Кадмий	Cd	112.41	$4d^{10}5s^2$	$^1S$	3.237	8.994	16.908
49	Индий	In	114.82	$5s^25p$	$^2P$	3.778	5.786	18.870
50	Олово	Sn	118.69	$5s^25p^2$	$^3P$	3.286	7.344	14.632
51	Сурьма	Sb	121.75	$5s^25p^3$	$^4S$	2.952	8.608	16.53
52	Теллур	Te	127.60	$5s^25p^4$	$^3P$	2.701	9.010	18.6
53	Иод	I	126.90	$5s^25p^5$	$^2P$	2.502	10.451	19.131
54	Ксенон	Xe	131.30	$5s^25p^6$	$^1S$	2.338	12.130	21.21
55	Цезий	Cs	132.91	$6s$	$^2S$	6.30	3.894	25.08
56	Барий	Ba	137.33	$6s^2$	$^1S$	5.25	5.212	10.004
57	Лантан	La	138.91	$5d6s^2$	$^2D$	4.93	5.577	11.06
58	Церий	Ce	140.12	$4f^5d6s^2$	$^1G$	4.88	5.539	10.85
59	Празеодим	Pr	140.9	$4f^36s^2$	$^4I$	5.06	5.473	10.55
60	Неодим	Nd	144.24	$4f^46s^2$	$^5I$	5.01	5.526	10.73

Атомный номер	Элемент	Символ	Атомная масса	Электронная конфигурация	Основной терм	Средний радиус, ед. $a_0$	Потенциалы ионизации, эВ	
							I	II
61	Прометий	Pm	[145]	$4f^5 6s^2$	$^6H$	4.96	5.582	10.9
62	Самарий	Sm	150.4	$4f^6 6s^2$	$^7F$	4.91	5.644	11.07
63	Европий	Eu	151.96	$4f^7 6s^2$	$^8S$	4.86	5.670	11.24
64	Гадолиний	Gd	157.25	$4f^7 5d 6s^2$	$^9D$	4.58	6.150	12.09
65	Тербий	Tb	158.93	$4f^9 6s^2$	$^6H$	4.77	5.864	11.52
66	Диспрозий	Dy	162.50	$4f^{10} 6s^2$	$^5I$	4.73	5.939	11.67
67	Гольмий	Ho	164.93	$4f^{11} 6s^2$	$^4I$	4.69	6.022	11.80
68	Эрбий	Er	167.26	$4f^{12} 6s^2$	$^3H$	4.65	6.108	11.93
69	Тулий	Tm	168.93	$4f^{13} 6s^2$	$^2F$	4.61	6.184	12.05
70	Иттербий	Yb	173.04	$4f^{14} 6s^2$	$^1S$	4.57	6.254	12.76
71	Лютеций	Lu	174.97	$4f^{14} 5d 6s^2$	$^2D$	4.27	5.426	12.97
72	Гафний	Hf	178.49	$5d^2 6s^2$	$^3F$	4.08	6.454	13.78
73	Тантал	Ta	180.95	$5d^3 6s^2$	$^4F$	3.94	7.89	14.47
74	Вольфрам	W	183.85	$5d^4 6s^2$	$^5D$	3.82	7.98	15.08
75	Рений	Re	186.21	$5d^5 6s^2$	$^6S$	3.72	7.88	15.73
76	Осмий	Os	190.2	$5d^6 6s^2$	$^5D$	3.62	8.73	16.34
77	Иридий	Ir	192.2	$5d^7 6s^2$	$^4F$	3.53	9.05	16.91
78	Платина	Pt	195.09	$5d^9 6s$	$^3D$	3.72	8.96	18.563
79	Золото	Au	196.97	$5d^{10} 6s$	$^2S$	3.70	9.226	20.56
80	Ртуть	Hg	200.59	$5d^{10} 6s^2$	$^1S$	3.33	10.438	18.756
81	Таллий	Tl	204.37	$6s^2 6p$	$^2P$	3.92	6.108	20.428
82	Свинец	Pb	207.21	$6s^2 6p^2$	$^3P$	3.42	7.417	15.032
83	Висмут	Bi	208.98	$6s^2 6p^3$	$^4S$	3.08	7.285	16.69
84	Полоний	Po	[209]	$6s^2 6p^4$	$^3P$	-	8.417	17.18
85	Астат	At	[210]	$6s^2 6p^5$	$^2P$	-	9.224	19.10
86	Радон	Rn	[222]	$6s^2 6p^6$	$^1S$	2.54	10.749	20.99
87	Франций	Fr	[223]	$7s$	$^2S$	-	4.073	20.02
88	Радий	Ra	226.03	$7s^2$	$^1S$	-	5.279	10.147
89	Актиний	Ac	227.03	$6d 7s^2$	$^2D$	-	5.17	11.04
90	Торий	Th	232.04	$6d^2 7s^2$	$^3F$	5.00	6.08	11.90
91	Протактиний	Pa	231.04	$5f^2 6d 7s^2$	$^4K$	5.35	5.89	11.46



Атомный номер	Элемент	Символ	Атомная масса	Электронная конфигурация	Основной терм	Средний радиус, ед. $a_0$	Потенциалы ионизации, эВ	
							I	II
92	Уран	U	238.03	$5f^3 6d 7s^2$	$^5L$	5.08	6.194	11.63
93	Нептуний	Np	237.05	$5f^4 6d 7s^2$	$^6L$	-	6.266	11.80
94	Плутоний	Pu	[244]	$5f^6 7s^2$	$^7F$	5.18	6.06	11.19
95	Амерций	Am	[243]	$5f^7 7s^2$	$^8S$		5.99	12.15
96	Кюрий	Cm	[245]	$5f^7 6d 7s^2$	$^9D$		6.02	12.36
97	Берклий	Bk	[247]	$5f^9 7s^2$	$^8H$		6.23	12.57
98	Калифорний	Cf	[249]	$5f^{10} 7s^2$	$^5I$		6.30	11.83
99	Эйнштейний	Es	[254]	$5f^{11} 7s^2$	$^4I$		6.42	11.98
100	Фермий	Fm	[253]	$5f^{12} 7s^2$	$^3H$		6.50	12.14
101	Менделевий	Md	[255]	$5f^{13} 7s^2$	$^2F$		6.58	12.29
102	Нобелий	No	[255]	$5f^{14} 7s^2$	$^1S$		6.65	12.45
103	Лоуренсий	Lr	[257]	$5f^{14} 6d 7s^2$	$^2D$		4.312	14.00
104	Резерфордий	Rf	[261]	$6d^2 7s^2$				
105	Дубний	Db	[262]	$6d^3 7s^2$				
106	Сиборгий	Sg	[263]	$6d^4 7s$				
107	Борий	Bh	[262]	$6d^5 7s$				
108	Хассий	Hs	[264]	$6d^6 7s$				
109	Мейтнерий	Mt	[266]	$6d^7 7s$				

## Примечания

1. В квадратных скобках указаны массовые числа наиболее устойчивых изотопов данного элемента.
2. Основные термы всех элементов заданы в приближении  $LS$ -связи. Это приближение нарушается для тяжелых атомов, поэтому представленные данные для тяжелых атомов достаточно условны.
3. Под средним радиусом атома понимается среднее удаление валентного электрона от атомного ядра. Эта величина рассчитывалась по формуле

$$\langle r \rangle = \int_0^{\infty} r^3 |\psi|^2 dr,$$

где одноэлектронная радиальная волновая функция была получена путем разложения в ряд по базису слэтеровских атомных орбиталей.

### Параметры некоторых двухатомных молекул

Молекула	Основной электронный терм	Потенциал ионизации, эВ	Равновесное межъядерное расстояние, А	Колебательный квант, эВ	Вращательная постоянная <sup>(*)</sup> , эВ	Энергия диссоциации, эВ
H <sub>2</sub> <sup>+</sup>	2Σ	29.9	1.06	0.285	3.70(-3)	2.649
H <sub>2</sub>	1Σ	15.426	0.741	0.545	7.55(-3)	4.48
N <sub>2</sub>	1Σ	15.580	1.098	0.293	2.48(-4)	9.76
O <sub>2</sub>	3Σ	12.077	1.207	0.196	1.79(-4)	5.12
F <sub>2</sub>	1Σ	15.686	1.417	0.141	1.10(-4)	1.38
Cl <sub>2</sub>	1Σ	11.48	1.988	0.069	2.08(-5)	2.50
Br <sub>2</sub>	1Σ	10.56	2.281	0.040	1.01(-5)	1.97
I <sub>2</sub>	1Σ	9.4	2.666	0.027	4.64(-6)	1.54
Li <sub>2</sub>	1Σ	5.15	2.67	0.044	8.35(-5)	1.03
HCl	1Σ	12.74	1.275	0.371	1.30(-3)	4.43
HBr	1Σ	11.62	1.414	0.329	1.04(-3)	3.75
HI	1Σ	10.38	1.609	0.287	7.98(-4)	3.06
LiH	1Σ	7.85	1.595	0.174	9.34(-4)	2.43
Na <sub>2</sub>	1Σ	4.90	3.077	0.020	1.92(-5)	0.75
NaCl	1Σ	8.92	2.361	0.045	2.71(-5)	4.3
CO	1Σ	14.014	1.128	0.269	2.40(-4)	11.09
NO	2Π	9.264	1.151	0.237	2.12(-4)	6.50
OH	2Π	13.18	0.971	0.464	2.34(-3)	4.40
CN	2Σ	14.20	1.172	0.257	2.36(-4)	7.75
CH	2Π	10.9	1.120	0.355	1.76(-3)	3.45

<sup>(\*)</sup> Число 7.55(-3) следует читать как  $7.55 \cdot 10^{-3}$ .

**Длины волн и силы осцилляторов переходов  
некоторых атомных переходов**

Атом	Переход	Длина волны, Å	Сила осциллятора
H	$1s \rightarrow 2p$	1215.7	0.416
	$1s \rightarrow 3p$	10025.7	0.079
	$1s \rightarrow 4p$	972.5	0.029
	$2s \rightarrow 3p$	6562.7	0.435
	$2p \rightarrow 3s$	6562.9	0.0136
	$2p \rightarrow 3d$	6562.8	0.696
	$2s \rightarrow 4p$	4861.29	0.103
	$2p \rightarrow 4s$	4861.35	0.0030
	$2p \rightarrow 4d$	4861.33	0.122
He	$1s^2(^1S) \rightarrow 1s2p(^1P)$	584.3	0.276
	$1s^2(^1S) \rightarrow 1s3p(^1P)$	537.0	0.0734
	$1s^2(^1S) \rightarrow 1s4p(^1P)$	522.2	0.030
	$1s2s(^1S) \rightarrow 1s2p(^1P)$	20581.3	0.376
	$1s2s(^1S) \rightarrow 1s3p(^1P)$	5015.7	0.151
	$1s2s(^1S) \rightarrow 1s4p(^1P)$	3964.7	0.14
	$1s2s(^3S) \rightarrow 1s2p(^3P)$	10830	0.539
	$1s2s(^3S) \rightarrow 1s3p(^3P)$	3888.6	0.0645
	$1s2s(^3S) \rightarrow 1s4p(^3P)$	3187.7	0.023
Li	$2s_{1/2} \rightarrow 2p_{1/2}$	6707.91	0.251
	$2s_{1/2} \rightarrow 2p_{3/2}$	6707.76	0.502
	$2p_{1/2} \rightarrow 3s_{1/2}$	8126.23	0.115
	$2p_{3/2} \rightarrow 3s_{1/2}$	8126.45	0.115
Na	$3s_{1/2} \rightarrow 3p_{1/2}$	5895.9	0.324
	$3s_{1/2} \rightarrow 3p_{3/2}$	5889.9	0.648
	$3s_{1/2} \rightarrow 4p_{1/2}$	3303.9	0.051
	$3s_{1/2} \rightarrow 4p_{3/2}$	3302.9	0.102
	$3p_{1/2} \rightarrow 4s_{1/2}$	22057.0	0.167
	$3p_{3/2} \rightarrow 4s_{1/2}$	22084.0	0.335

Атом	Переход	Длина волны, А	Сила осциллятора
К	$4s_{1/2} \rightarrow 4p_{1/2}$	7699.0	0.347
	$4s_{1/2} \rightarrow 4p_{3/2}$	7664.9	0.684
	$4p_{1/2} \rightarrow 5s_{1/2}$	12434.3	0.051
	$4p_{3/2} \rightarrow 5s_{1/2}$	12523.0	0.102
Rb	$5s_{1/2} \rightarrow 5p_{1/2}$	7947.6	0.363
	$5s_{1/2} \rightarrow 5p_{3/2}$	7800.23	0.726
	$5p_{1/2} \rightarrow 6s_{1/2}$	13237.3	0.187
	$5p_{3/2} \rightarrow 6s_{1/2}$	13667.0	0.364
Cs	$6s_{1/2} \rightarrow 6p_{1/2}$	8943.5	0.394
	$5s_{1/2} \rightarrow 6p_{3/2}$	8521.2	0.814
	$6p_{1/2} \rightarrow 7s_{1/2}$	4593.2	0.00284
	$6p_{1/2} \rightarrow 7p_{3/2}$	45554.4	0.0174
Be	$2s^2 \rightarrow 2s2p(^1P)$	2348.61	1.36
	$2s2p(^1P) \rightarrow 2s3s(^1S)$	8254.1	0.13
	$2s2p(^1P) \rightarrow 2s3d(^1D)$	4572.7	0.19
	$2s2p(^3P) \rightarrow 2s3s(^3S)$	3321.2	0.034
	$2s2p(^3P) \rightarrow 2s3d(^3D)$	2494.6	0.16
	$2s2p(^3P) \rightarrow 2p^2(^3P)$	2650.6	0.466
B	$2s^2 2p \rightarrow 2s^2 3s$	2497.4	0.11
	$2s^2 2p \rightarrow 2s^2 3d$	2089.3	0.24
	$2s^2 3s \rightarrow 2s^2 3p$	11661	1.07
	$2s^2 2p \rightarrow 2s2p^2(^2D)$	2089.3	0.24
	$2s^2 2p \rightarrow 2s2p^2(^2S)$	1573.5	0.16
Mg	$3s^2 \rightarrow 3s3p(^1P)$	2852	1.2
	$3s^2 \rightarrow 3s3p(^3P)$	4571.1	$2.6 \times 10^{-6}$

Атом	Переход	Длина волны, А	Сила осциллятора
Al	$3s^2 3p(^2P_{1/2}) \rightarrow 3s^2 4s(^2S_{1/2})$	3944.0	0.15
	$3s^2 3p(^2P_{3/2}) \rightarrow 3s^2 4s(^2S_{1/2})$	3962.0	0.15
	$3s^2 3p(^2P_{3/2}) \rightarrow 3s^2 4d(^2D_{3/2,5/2})$	3092.0	0.23
	$3s^2 3p(^2P_{1/2}) \rightarrow 3s^2 4d(^2D_{3/2})$	3089.0	0.22

Сила осциллятора перехода  $i \rightarrow f$  ( $i, f$  — совокупности квантовых чисел начального и конечного состояний атома) определяется с помощью следующего выражения

$$F_{fi} = \frac{1}{g_i} \frac{2m\omega_{fi}}{3\hbar e^2} |d_{fi}|^2, \text{ где } \omega_{fi} \text{ — частота перехода,}$$

$d_{fi}$  — матричный элемент дипольного момента атома,  $g_i = 2J_i + 1$  — кратность вырождения начального состояния ( $J$  — квантовое число полного механического момента атома). Вероятность перехода в единицу времени из состояния  $|i\rangle$  в состояние  $|f\rangle$  определяется выражением

$$w_{fi} = \frac{2e^2 \omega_{fi}^2}{mc^3} F_{fi}.$$

Время жизни относительно спонтанного перехода состояния  $|i\rangle$  определяется как  $\tau_i = (\sum_f w_{fi})^{-1}$ , где сумма берется по всем нижележащим состояниям.

### Метастабильные состояния атомов

Атом	Состояние	Энергия возбуждения, эВ	Время жизни, с
H	$2s$	10.20	0.142
He	$1s2s(^3S)$	19.82	$6 \cdot 10^5$
	$1s2s(^1S)$	20.61	0.038
N	$2p^3(^2D_{5/2})$	2.384	$6 \cdot 10^4$
	$2p^3(^2D_{3/2})$	2.385	$1.4 \cdot 10^5$
	$2p^3(^2P)$	3.58	13
O	$2p^4(^1D_2)$	1.97	110
	$2p^4(^1S)$	4.19	0.8



## Дополнительная литература

1. *Попов А. М., Тихонова О. В.* Лекции по атомной физике. М.: Физфак МГУ, (2007).
2. *Шпольский Э. В.* Атомная физика. т.1,2. СПб: Лань, 2010. Т. 1, 2
3. *Гольдин Л. Л., Новикова Г. И.* Введение в квантовую физику. М.: Наука, 1988.
4. *Сивухин Д. В.* Курс общей физики. М.: Физматлит МФТИ, 2002. Т. 5: Атомная и ядерная физика.
5. *Милантьев В. П.* Физика атома и атомных явлений, М.: Высшая школа, 2010.
6. *Барсуков О. А., Ельяшевич М. А.* Основы атомной физики. М.: Научный мир, 2006.
7. *Вихман Э.* Квантовая физика. М.: Наука, 1974.
8. *Фейнман Р., Лейтон Р., Сэндс М.* Фейнмановские лекции по физике. М.: УРСС Мир, 2009. Т. 3, 8, 9.
9. *Борн М.* Атомная физика. М.: Мир, 1965.
10. *Ахманов С. А., Никитин С. Ю.* Физическая оптика. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1999.
11. *Соколов А. А., Тернов И. М.* Квантовая механика и атомная физика. М.: Просвещение, 1970.
12. *Балашов В. В., Долинов В. К.,* Курс квантовой механики. М.: Изд-во Моск. ун-та, 2001.
13. *Елютин П. В., Кривченков В. Д.* Квантовая механика. М.: Наука, 1976.
14. *Бете Г.* Квантовая механика. М.: Мир, 1965.
15. *Флюгге З.* Задачи по квантовой механике. Изд-во Меркурий-Пресс, 2000. Т. 1, 2.
16. *Бете Г., Солпитер Э.* Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами. М., 1960.
17. *Собельман И. И.* Введение в теорию атомных спектров. М.: Наука, 1977.
18. *Радциг А. А., Смирнов Б. М.* Справочник по атомной и молекулярной физике. М.: Атомиздат, 1980.

*Учебное издание*

**Гуляев Алексей Владимирович  
Красильников Сергей Сергеевич  
Попов Александр Михайлович  
Тихонова Ольга Владимировна  
Харин Василий Юрьевич**

**Сто одиннадцать задач по атомной физике**

Редактор Г. С. Савельева  
Художественный редактор Ю. М. Добрянская  
Обложка художника В. А. Чернецова  
Технический редактор Н. И. Матюшина  
Корректор А. П. Гундаев  
Компьютерная вёрстка А. В. Гуляев, А. М. Попов, В. Ю Харин



Подписано в печать 28.06.2012. Формат 60×90  $\frac{1}{16}$ .  
Бумага офс. №1. Офсетная печать. Гарнитура Таймс.  
Уч.-изд. л. 12,5. Тираж экз. Изд. № 9696. Заказ № .

Ордена “Знак Почёта”  
Издательство Московского университета.  
125009, Москва, ул. Б. Никитская, 5/7.  
Тел.: (495) 629-50-91. Факс (495) 697-66-71.  
E-mail: [secretary-msu-press@yandex.ru](mailto:secretary-msu-press@yandex.ru)  
Сайт Издательства МГУ: [www.msu.ru/depts/MSUPubl2005](http://www.msu.ru/depts/MSUPubl2005)  
Интернет-магазин: [www.msupublishing.ru](http://www.msupublishing.ru)

Адрес отдела реализации:  
Москва, ул. Хохлова, 11 (Воробьёвы горы, МГУ).  
E-mail: [izd-mgu@yandex.ru](mailto:izd-mgu@yandex.ru) Тел.: (495) 939-34-93