

1. Характеристики теплового излучения
Все тела излучают эл-магн волны за счет различных источников энергии. Самым общим видом излучения явл. тепловое излучение, происход. за счет внутр. энергии тела. Это излучение явл. всеобщим, носит фундаментальный характер. В изолиров. системе тел тепловое излучч приводит к установлению теплового равновесия. Поток энергии $\frac{dw}{dt}$, испускаемое телом по всем направлениям, отнесенных к площади излучающей поверхности называют энергет. светимостью и обозн. $R_T = \frac{dw}{d\omega d\epsilon}$; Излучаются эл-магнитные волны различных частот $\omega = 2\pi\nu$; Поток энергии, излучч. с единичной площади тела, волновой частоты от ω до $\omega + d\omega$ пропорционален $d\omega$ и равен $dR = r_{wT}d\omega$; $r_{wT}(r(w,T))$ – испускательная способность. Тела не только испускают, но и поглощают эл-магн поле. Пусть на элементарную площадку поверхности тела падает поток энергии $d\Phi_w$. Часть этого потока $d'\Phi_w$ поглощается телом. Величина $a_{wT} = \frac{d'\Phi_{wT}}{d\Phi_w}$ назыв. поглощательной способностью. Если тело поглощает полностью падающее на него излучение, то его назыв. абсолютно черным телом (ачт); для него $a_{wT} = 1$; Чем больше тело поглощает, тем сильнее оно должно излучать. **Теорема Кирхгофа**: отношение испускательной/поглощательной способности не зависит от природы тела и явл. универсальной ф-ией частоты и температуры $\frac{a_{wT}}{a_{wT}} = \dots = f(w,T)$; Очевидно, что $r_{wT}^* = f(w,T)$
 $R_T = \int_0^\infty r_{wT}dw = \int w = \frac{2\pi c}{\lambda} dw = -\frac{2\pi c}{\lambda^2} = \int_0^\infty \frac{r_{2\pi c}}{\lambda}$, $T \cdot \frac{2\pi c}{\lambda^2} d\lambda$; Испускат. способность переменных λ , T: $f(\lambda T) = \frac{2\pi c}{\lambda^2} \cdot \frac{r_{2\pi c}}{\lambda}$, T; Функция Кирхгофа, совпадающая с r_{wT}^* переменных λ , T: $\varphi(w,T) = \frac{2\pi c}{\lambda^2} f(w,T)$, где $r_{wT}^*, \rho_{wT}^*, \varphi(w,T), f(w,T)$ можно установить экспериментально, наблюдая излучение через маленькое отверстие замкнутой полости. Как показывает опыт в замкнутой полости, содерж. несколько тел с различной температурой с течением времени температура тел уравнивается, если поддерживать стенки полости при постоянной температуре. Выравнивание температуры происходит в результате обмена энергией с помощью эл-магн излучения. В результате объем полости будет заполнен эл-магн волнами, плотность энергии которых $u(T)$. Присутствуют волны различной частоты поэтому $u(T) = \int_0^\infty u(w,T)dw$; $u(w,T)$ – равновесная плотность энергии теплового излучения. Легко показать, что $f(w,T) = r_{wT}^* = \frac{c}{u(w,T)}$

5. Внешний фотоэффект. Формула Эйнштейна
Внешний фотоэлектр. эффект – испускание электронов с пов-сти под действием света. При увелич U между катодом и анодом сила фототока возрастает. Фототок прекращается при $U_3 < 0$. Зная U_3 , можно определить макс. кинет. энергию $E_{kmax} = \frac{mv^2}{2} = eU_3$. Исследование св-в фотоэффекта приводит к след. выводам:
1) Фототок насыщения – число фотоэлектр убыв. из катода в ед. времени- прямо пропорционально интенсивности падающего тока. 2) Макс. кинет. энергия фотоэлектрона не зависит от интенсивности света и явл. линейной функцией частоты падающего излучения. Результат противоречит классич теории, согласно которой E_{kmax} должна возрастать с увеличением интенсивности света. 3) Для каждого вещества сущ. граничная частота $\omega_0(\lambda_0)$, такая что излучение с меньшей частотой больше не приводит к фотоэффекту, согласно классич теории, фотоэффект должен наблюдаться при любой частоте за счёт увеличения интенсивности падающего излучения. Эйнштейн показал, что все св-ва фотоэффекта объясняются, если предположить, что свет не только излучается порциями, но и поглощается такими же порциями. То в соотв с законом сохранения энергии при отсутствии случайных столкновений фотоэлектрона можно записать $\hbar\omega = A + \frac{mv_{max}^2}{2}$. Работа A зависит от в-ва и состояния его поверхности, но не зависит от ω . Из предположения Эйнштейна следует 3 св-ва фотоэффекта: 2) $E_{kmax} = \hbar\omega - A$ – линейная ф-ция частоты. 3) $0 - \hbar\omega - A, \omega_0 - \frac{A}{\hbar}$ – красная граница фотоэффекта.

2. Закон Стефана-Больцмана. Закон смещения Вина
В силу всеобщности теплового излучения возникает необходимость теоретич. получения выражения для $r_{wT}^* = f(w,T), u(w,T), R_T^*$ из основных законов физики. Основанием термодинамич. соображений Стефан, Больцман показали, что энергетич. светимость ачт прямопропорц. четвертой степени абсолютной температуры тела $R_T^* = \sigma T^4$ – закон Стефана-Больцмана. Закон согласуется с экспериментом. Далее Вином было установлено, что ф-ция Кирхгофа должна иметь вид: $f(w,T) = w^3 F\left(\frac{w}{T}\right)$, F – неизвестная ф-ция. Очевидно, $\varphi(\lambda,T) = \frac{(2\pi c)^4}{\lambda^5} \cdot F\left(\frac{2\pi c}{\lambda T}\right) = \frac{1}{\lambda^5} \psi(\lambda,T)$. Последнее выражение позволяет определить длину волны λ_m , при которой наблжд. максимум. И максимум испускательной способности ачт $\rho^*(\lambda,T) = \varphi(\lambda,T)$; $\frac{d\varphi}{d\lambda} = -\frac{5}{\lambda^6} \psi + \frac{1}{\lambda^5} \frac{d\psi}{dx} \cdot T = \frac{1}{\lambda^6} (-54(x) + x \frac{d\psi}{dx}) = 0$ Скобка должна =0. Этому соотв. некоторый корень $x=b \Rightarrow \lambda_m T = b - 3-н$ смещения Вина. Произведение λ_m на абсолютную температуру ачт есть величина постоянная (постояная Вина).

6. Фотоны. Эффект Комптона
Для объяснения ряда явлений необходимо предположить, что свет – поток фотонов. Т.к. скорость света c , то и скорость фотонов c . В релятивистской теории устанавливается связь между энергией и импульсом частицы: $E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4$; Для частицы, движущейся со скоростью c , $m=0$: $E = pc$; $E = \hbar\omega$; то $p = \frac{E}{c} = \frac{\hbar\omega}{c} = \hbar k$; $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ – волновое число. В векторном виде $\vec{p} = \hbar \vec{k}$; Свойства фотона: 1) $m=0$; 2) $E = \hbar\omega$; 3) $\vec{p} = \hbar \vec{k}$; $k = \frac{2\pi}{\lambda}$. Корпускулярные св-ва света чётко проявляются в эффекте Комптона-теории рассеяния рентгеновских лучей в-вом. На рассеивающее в-во падает узкий пучок монохроматического рентгеновских лучей. Рассеянное излучение исследуется с помощью рентгеновского спектрографа. Оказалось, что в направлении, задаваемом углом θ наблюдаются волны, длины которых λ и $\lambda' > \lambda$. Оказалось, что $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda$ не зависит от λ . Интенсивность излучения s λ' убывает с увеличением зарядного номера Z. Результаты опытов противоречат представлению о волновой природе света. Св-ва рассеяния получаются в предположении, что рентгеновское излучение – поток фотонов. Эти частицы упруго рассеиваются на практически свободных валентных электронах рассеивающего. в-ва. Тогда из закона сохранения энергии следует: $mc^2 + \hbar\omega = \hbar\omega' + c\sqrt{p^2 + m^2 c^2}$; То $p^2 = 2mc^2 \hbar(k - k')$; Т.к. $\hbar k = \hbar k' + p'$, то $p^2 = \hbar^2 k^2 + \hbar^2 k'^2 - 2\hbar^2 k k'$; Приравняем полученные выражение: $2mc^2 \hbar(k - k') = \hbar^2 k^2 + \hbar^2 k'^2 - 2\hbar^2 k k'$; Волновое число $k = \frac{w}{c} = \frac{2\pi v}{c} = \frac{2\pi}{\lambda}$. В результате получаем: $\lambda' - \lambda = \Delta\lambda = \frac{2\pi\hbar}{mc} (1 - \cos \theta)$; Получим выражение для $\Delta\lambda$, зависящее только от угла рассеивания θ . В комптоновской длине волны $\lambda_c = \frac{2\pi\hbar}{mc}$, где m -масса электрона. Излучение с λ возникает в случае рассеяния фотона на атоме рассеивающего в-ва. Тогда вместо m надо писать массу ядра, которая на 3-4 порядка больше m . Тогда, $\Delta\lambda \sim 0, \lambda' \sim \lambda$. Таким образом, для объяснения ряда явлений необходимо рассмотреть свет как поток классических частиц. С другой стороны, явление интерференции и дифракции можно объяснить только исходя из волновой природы света. Говорят, что наблюдается корпускулярно-волновой дуализм света.

3. Формула Релея-Джинса. Формула Планка
Используя 3-ны статической физики и электродинамики Релей, Джинс нашли выражение для равновесной плотности энергии теплового излучения $u(w,T) = \frac{w^2}{\pi^2 c^3} * kT = \frac{w^2 \cdot k}{\pi^2 c^3} * \frac{T}{w}$. Выражение удов-ет условиям Вина, в области низких частот совпадает с эксперимент. видами. Интегральная плотность энергии равновесного теплового излучения $u(T) = \int_0^\infty \frac{w^2}{\pi^2 c^3} kT dw \rightarrow \infty$. Формулу для $u(w,T)$, полностью совпадающую с эксперимент. кривой, написал Планк: $u(w,T) = \frac{\hbar w^3}{\pi^2 c^3} * \frac{1}{\exp(\frac{\hbar w}{kT}) - 1}$. Для обоснования ф.Планка он предположил, что эл-магн. излучение испускается в виде отдельных порций энергии (квантов, фотонов), величина которых пропорциональна частоте излучения $E = \hbar w = h\nu$, $h = 2\pi\hbar$, h – постоянная Планка. Ф-ла Планка удов-ет условию Вина, поэтому приводим к закону смещения Вина. Из ф.Планка следует закон Стефана-Больцмана: $R_T = \frac{h^2 k^4}{4\pi^2 c^3} \int_0^\infty \frac{x^3}{\exp(\frac{x}{T}) - 1} dx = \sigma T^4$. Ф-ла Планка полностью описывает теорию равновесного теплового излучения. Но в её основе лежит гипотеза Планка, противореч. представлениям классич. физики, согласно которой излучение может происходить любыми порциями энергии при заданной частоте, уменьшая амплитуду.

7. Спектр атома водорода. Постулаты Бора
Излучение, взаимодействующих друг с другом атомов, состоит из набора волн опред. частот. Спектр испускания атомов линейчатый. Было установлено, что спектр атома водорода состоит из нескольких серий, частоты которых определяются формулами:
 $w = R \left(\frac{1}{z^2} - \frac{1}{m^2} \right)$ – Лайман, ультрафиолетовое; $w = R \left(\frac{1}{z^2} - \frac{1}{m^2} \right)$ – Бальмер, видимый свет; $w = R \left(\frac{1}{z^2} - \frac{1}{m^2} \right)$ – Памен, инфракрасное. Общая формула для всех серий: $w_{mn} = R \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$; Из нее видно, что частоты любой линии спектра водорода представимы в виде разности двух чисел ряд $\frac{R}{2^2}, \frac{R}{3^2}, \dots$. $T(n) = \frac{R}{n^2}$ – терма. Изучая результаты рассеяния α -частиц на тонкой фольге, Резерфорд пришел к выводу, что атом состоит из массивного заряда +Ze ядра размером 10 – 14м. Ядро окружено Z электронами 3А. Электроны должны двигаться по искривленным траекториям, чтобы не упасть на ядро в результате кулоновского взаимодействия. Это ядерная модель атома. Ее недостатки: 1) Двигаясь по искривленной траектории, электроны обладают норм ускорением, из-за чего излуч. электроны волны, теряет энергию, должны упасть на ядро. 2) Согласно классич. эл-магн излучч. классич. динамики электронов имеет направленный спектр. Для преодоления этих трудностей Бор предложил 2 постулата: 1) Из бесконечного множества электронных орбит осущ. только некоторые орбиты, удовлетв. опред. квантовым условием. В простейшем случае: круговых орбит условия квантования Бора имеют вид: $mvr = n\hbar$, $n = 1, 2, 3, \dots$ Электрон, находящийся на такой стационарной орбите, может двигаться долго, не излучая. 2) Излучение поглощается/испускается в виде светового кванта при переходе электронов из одного стац. состояния в другое. Величина энергии равна разности энергий тех стац. состояний, между которыми осущ. квантовый скачок электронов. Теория Бора позволяет найти возможные знач. энергии атомов водорода и водородоподобных ионов. Ур-ние движения электронов по круговой орбите и условия квантования Бора: 1) $\frac{mv^2}{r} = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}$; 2) $mvr = n\hbar \Rightarrow v = \frac{n\hbar}{mr}$; $r^n = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{mZe^2} n^2$; Нашли возможные знач. радиусов стац. орбит. Энергия электрона: $E = \frac{mv^2}{2} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} = -\frac{Ze^2}{2(4\pi\epsilon_0)} \cdot \frac{1}{r^n}$. Подставив r_n получаем возможные значения электрона: $E_n = -\frac{mZ^2 e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2}$; В соотв. со 2 постулатом Бора при переходе электрона из с-та с энергией E_m в с-ст с энергией E_n излучается фотон с $w_{mn} = \frac{E_m - E_n}{h}$ = $\frac{mZ^2 e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$; Получили формулу Бальмера. Теория Бора дает правильное описание спектра излучч. атома водорода, но она логически противоречива.

4. Короткая волновая граница тормозного рентгеновского спектра
Рентгеновские лучи (часть спектра эл-м волн) возникает при бомбардировке быстрыми электронами тяжелых твердых вещей. Электроны, испуск. фотоном, ускоряется за счет высокого напряжения в несколько десятков киловольт достигает тяжелого анода и испытывает резкое торможение (движение равноускоренное). Электроны при торможении, как и любой другой заряд теряют энергию в виде испускаемых эл-м волн – рентгеновские лучи. При напряжении $U = 50$ кВ скорость электронов на аноде $V = 0,4c$. Согласно классич. теории должны испускаться волны любой частоты (длины волны). Однако графики экспер. кривых распределения мощности тормозного рентгеновского излучения по длинам волн обрывается при некоторой знач. λ_{min} . Оказалось, что $\lambda_{min} = \frac{123900}{U}$ Å, $1\text{Å} = 10^{-10}\text{м}$. Существование короткой волновой границы вытекает из гипотезы Планка. $eU = \hbar w = 2\pi\hbar\nu = \frac{2\pi\hbar c}{\lambda_{min}} \Rightarrow \lambda_{min} = \frac{2\pi\hbar c}{eU}$ соответствует излучению энергии электрона eU в виде одного фотона. Измерения позволяют точно определить значение h .

8. Гипотеза Де Бройля. Необыч. св-ва микрочастиц.
Де Бройль выдвинул гипотезу: частицы в-ва, как и свет, обладают не только корпускулярными св-вами, но и волновыми. Для света волновые и корпуск. св-ва связаны соотно: $E = \hbar\omega$; $p = \frac{2\pi\hbar}{\lambda}$ ($\vec{p} = \hbar\vec{k}$; $p = \frac{E}{c} = \frac{\hbar\omega}{c}$)
Де Бройль обобщил эти соотношения на частицу с импульсом p и энергией E , приписав волновые хар-ки: $\omega = \frac{E}{\hbar}$; $\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p}$; Гипотеза Дэвиса Джернер: Узкий пучок моноэнергетич. электронов, ускоренный разностью потенциалов U , падает под углом скольжения θ на пов-сть монокристалла никеля, отраженный пучок улавлив. цилиндрич. электродом. Интенсивность отражения пучка опред. амперметром-гальванометром. Оказалось, что интенсивность зависела от угла θ и энергии электрона: $E_k = \frac{p^2}{2m} \gg p = \sqrt{2mE_k}$; Интенсивность менялась от \min до \max значения и θ в соответствии с формулой: $2b \sin \theta = k\lambda$, где $k = 1, 2, \dots$. b -расстояние между соседними атомами-плоскостями. Ф-ла была получена для дифф. рентгеновских лучей на кристаллах. Длина волны λ оказалась равной длине волны де-Бройля: $\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2mE_k}}$; Волновые св-ва электронов проявлялись также в опыте Томпсона и Тартаковского. Узкий пучок моноэнергетических электронов, падая на тонкую фольгу и проходя ее, рассеивался и на экране возникала картина из чередующихся темных и светлых колец, характерная для дифракции. Рассм. своеобразие св-в микрочастиц на основе следующего мысленного эксперимента: Две параллельные щели 1 и 2 ширины b находятся на расстоянии d . 1) Щель 2 закрыта: Возникает картина на Э1. Ширина первого дифф. максимума определяется усл.: $b \sin \varphi = \lambda \Rightarrow b \frac{\Delta x_1}{2a} = \lambda \Rightarrow \Delta x_1 = \frac{2L\lambda}{b}$; 2) Щель 1 закрыта, 2 открыта: $\Delta x_1 = \Delta x_2$; 3) Обе щели открыты: получ. картина соотв. интерференционному опыту Юнга, в котором набл. ряд чередующихся светлых и темных полос: $\Delta x_{12} = \frac{L\lambda}{d}$; $\frac{\Delta x_1}{\Delta x_{12}} = \frac{2d}{b} \gg 1$; Эксперименты показыв., что микрочастица проявляет себя как волна и частица. Такое сочетание св-в нельзя описать с помощью наглядных образов маж. точки и волны классич. теории, поэтому надо отказаться от попыток построения наглядной модели, что всегда возможно для классич. объектов. В отличии от классич. частицы, микрочастица не обладает траекторией. Микрочастица выступает как единое целое и им свойствен корпускулярно-волновой дуализм.

<p>9. Уравнение Шредингера Развивая идею де Бройля о волновых св-вах микрочастиц, Шредингер сопоставил их движению комплексную ф-цию координат и времени $\Psi(\vec{r}, t)$. Её назыв волновой ф-цией или пси-функцией. Пси-функция характеризует состояние микрочастицы и содержит всю информацию о ее движении. Конкретно вид пси-функции получ при решении ур-ния УШ: $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + U\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$ Где m–масса частицы, i- мнимая единица, $\nabla^2=\Delta$ - оператор Лапласа; $U = U(\vec{r}, t)$ – ф-ция координат и времени, антиградиент которой дает силу дейст на частицу: $-\nabla U = \vec{F}$. Если U не зависит от времени, то она имеет смысл потенц энергии. Кратко УШ записывают в виде: $\hat{H}\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$. Оператор Гамильтона: $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U$. Под оператором подразумевают правило, в соотв с которым одной ф-ции f сопоставл другая φ: $\varphi = \hat{Q}f$. Если U не зависит от времени, то можно разделить переменные времени и координат, представив пси-функцию в виде: $\Psi(\vec{r}, t) = f(t)\Psi(\vec{r})$. Подставив это выражение в УШ, получаем $-\frac{\hbar^2}{2m}f(t)\nabla^2\Psi(\vec{r}) + Uf(t)\Psi(\vec{r}) = i\hbar\Psi(\vec{r})\frac{df(t)}{dt}$; Обе стороны ур-ния равны некоторой постоянной E. Правая сторона позволяет найти $f(t)$: $i\hbar\frac{df(t)}{dt} = Ef(t) \Rightarrow f(t) = Ce^{-\frac{Et}{\hbar}}$ с произвольной постоянной C. Левая сторона приводит к стац УШ: $\hat{H}\Psi = E\Psi$. Чтобы выяснить смысл E, рассм свободное движение частицы, когда $U = 0$. УШ запишется в виде: $\nabla^2\Psi(\vec{r}) + \frac{2m}{\hbar^2}E\Psi(\vec{r}) = 0$. Подстановкой легко убедиться, что частным решением будет: $\Psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$. Соотв решение временного УШ: $\Psi(\vec{r}, t) = Ae^{-i(\frac{E}{\hbar}t - \vec{k}\cdot\vec{r})} = Ae^{-i(\omega t - \vec{k}\cdot\vec{r})}$. Получ решение является ур-нием плоской волны, частота которой: $\omega = \frac{E}{\hbar}$. То $E = \hbar\omega$, в соотв с гипотезой Планка постоянная $E >$ энергия частицы. В соотв с гипотезой де Бройля импульс частицы $\vec{p} = \hbar\vec{k}$. Отсюда вытекает связь между энергией и импульсом частицы: $E = \frac{\hbar^2}{2m}k^2 = \frac{p^2}{2m}$. УШ устанавливает связь между энергией и импульса частицы. Оно сопоставл частит энергии и импульса в плоскую волну с частотой волновым вектором. Оно явл важным ур-нием квантовой механике, правильность его следует из соотв выводов теории с наблюдаемыми явлениями экспериментами.</p>	<p>10. Смысл пси-ф-ции. Стандартные условия УШ явл. линейным, однородным. Поэтому его решение определено с точностью до произвольного постоянного множителя A. Функции Ψ и $A\Psi$ описывают одно и то же физич состояние. Воспольз произвольностью выбора A, можно потребовать выполнение условий. $\int_V \Psi^* \Psi dV = 1$. Реш. ф-ции удовл. этому условию, назыв. нормированным. $(a+ib)^* = a-ib$. Пси-ф-ция явл. комплексной ф-цией, не может иметь прямого физич смысла. Физич смысл имеет $\Psi^* \Psi$. В соотв с интерпретацией М. Борна вероятность обнаружить частицу в окрестности точки, задаваемой радиусом-вектором \vec{r} объемом dV равна: $dP\vec{r} = \Psi^*(\vec{r}, t)\Psi(\vec{r}, t)dV = \Psi(\vec{r}, t) ^2 dV$. То $\Psi^* \Psi = \rho(\vec{r}, t)$ плотность вероятности обнаружения частицы в точке задаваемой \vec{r}. Должно выполняться условие $\int_V \Psi^* \Psi(\vec{r}, t)dV = 1$, т.е условие нормиров. пси-ф-ции. Если нормировать ф-цию нельзя (интеграл расх-ся), то тогда следует считать, что $dP\vec{r} \approx \Psi^* \Psi dV$. В соотв. с физич смыслом пси-ф-ции и тем, что она явл. решением диффр. уравнением 2-го порядка на не накладываются условия: 1) Пси-ф-ция должна быть однозначной, непрерывной и конечной за исклюком точек, которых $u \rightarrow +\infty$ слишком быстро. 2) Если потенц энергия имеет пов-сти разрыва, то на каких пов-стях должны оставаться непрерывные пси-ф-ции и её первая производная. 3) Если в некоторой обл. $u = \infty$, то в этой области $\Psi = 0$. В силу непрерывности пси-ф-ции и на границы этой обл. $\Psi=0$. 4) Первые произв. пси-ф-ции должны быть непрерывными и конечными. Данные услов. назыв стандартными условия Стац. УШ: $\hat{H}\Psi = E\Psi$. Стац. УШ имеет решения при λ знач. E. Но лишь при некоторых знач E пси-ф-ции будут удовлетворять стандарт. условиям. Эти пси-ф-ции назыв. собств ф-циями оператора Гамильтона \hat{H}. Лишь собств. ф-ции и их линейные комбинации описывают физич. возможные сост. Знач. E, при которых выполн. стандартные усл. назыв собств знач. оператора Гамильтона. Совокупность собств знач. образует спектр. Лишь знач. энергии, принадл. спектру оператора могут наблюдаться на опыте. Спектр оператора может быть дискретным или непрерывным. В случае дискретного спектра знач. энергии можно пронумеровать и упорядочить $E_1, E_2, E_3, \Psi_1, \Psi_2, \Psi_3$. То квантовой энергии дискретный свет энергии получается из основных положений теорий: УШ, требование выполнения стандартных усл.</p>	<p>11. Принцип суперпозиции Временное УШ явл линейным и однородным, поэтому, если мы нашли его решения ψ_1 и ψ_2, то решением будет и $\psi = a_1\psi_1 + a_2\psi_2$. То с точки зрения математики, множество решений УШ образует линейное, векторное пространство над полем комплексных чисел. Введём скалярное произведение для двух векторов этого пространства: $(\psi_1, \psi_2) = \int_V \psi_1^*(\vec{r}, t)\psi_2(\vec{r}, t)dV$; Тогда условие нормировки означает $(\psi, \psi) = 1$. Можно показать, что вне собств ф-ции оператора Гамильтона ψ_n и ψ_k, отвечающим двум различным энергиям $E_n \neq E_k$ ортог.: $\langle \psi_n, \psi_k \rangle = \int_V \psi_n^*(\vec{r}, t)\psi_k(\vec{r}, t)dV = 0$. То собств ф-ция оператора Гамильтона образует ортогональный базис. Пусть ψ_1 – решение УШ с энергией E_1, а ψ_2 – с энергией E_2. В соотв с физич принципом суперпозиции решение $\psi = a_1\psi_1 + a_2\psi_2$ также описывает некоторое возможное состояние частицы. Вероятность нахождения энергии частиц, находящихся в таком состоянии: $P(E_1) = a_1^2 a_1^2 = a_1 ^2$; $P(E_2) = a_2 ^2$; Среднее значение энергии частицы в состоянии ψ: $\langle E \rangle = E_1 \frac{n_1}{n} + E_2 \frac{n_2}{n} = E_1 a_1 ^2 + E_2 a_2 ^2$; Это среднее знач можно вычислить как $\langle E \rangle = (\psi, \hat{H}\psi) = a_1 ^2 E_1 + 1 + a_2^2 a_1 + 0 + a_1^2 a_2 + 0 + a_2 ^2 E_2 + 1$; Среднее значение: $\langle E \rangle = (\psi, \hat{H}\psi) = \int \psi^* \hat{H}\psi dV$. Этот результат обобщается на любую физич величину.</p>	<p>12. Частица в бесконечно глубокой одномерной потенциальной яме Пусть частица может совершать одномерное движение вдоль оси Ох в пределах, ограниченных двумя абсолютно непроницаемыми стенками $X=0$, $X=L$. Потенц. энергия частица: $U=0$, при $0 \leq X \leq L$ и $U=\infty$, при $X<0$ и $X>L$. В классич. механике такая частица двигалась бы с постоянной скоростью, испытывая абсолютно твердый удар о стенки. Её энергия может принимать любые значения, включая нулевое. Квантово-механич частица движется хаотически в соответствии с УШ: $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + U\psi = E\psi$; В соотв со стандартными усл ф-ф-ия в областях 1 и 3 равна нулю($U=\infty$). В обл. 2 ф-ф-ия подчиняется ур-ю: $\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi_2 = 0$; Решение этого ур-я: $\psi_2 = \text{asin}(kx + \delta)$ с $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$. В соотв со стандартными условиями ψ должна быть непрерывной, т.е. $\psi_1(0) = \psi_2(0)$; $\psi_2(L) = \psi_2(0) \Rightarrow 0 = a \sin \delta \Rightarrow \delta = 0$; $0 = a \sin(kL) \Rightarrow kL = \pi n, n = 1, 2, 3 \dots$. В соотв со стандартными условиями $k_n = \frac{\pi n}{L}, n = 1, 2, 3 \dots$. Соответственно возможными знач энергии будут $E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2$; Таким образом энергия квантуется, а её возможные значения образуют дискретный спектр. Частица не может находиться в состоянии с нулевой энергией. Возможное сост частицы описываются ф-ф-ей: $\psi = a \sin \frac{\pi n x}{L}$. Коэффициент a вычисляется из условия нормировки: $\langle \psi \psi \rangle = a^2 \int_0^L \sin^2 \frac{\pi n x}{L} dx = \frac{a^2}{2} L = 1 \Rightarrow a = \sqrt{\frac{2}{L}}$; Из выражения для ψ_n и $\psi_n^* \psi_n$ плотность вероятности обнаружения частицы в точке x видно, что вероятность обнаружить частицу в разных местах потенц ямы различна. Выполняется условие ортогональности ф-ф-ии с различными энергиями $m \neq n \Rightarrow E_m \neq E_n$, то $\langle \psi_m \psi_n \rangle = \frac{2}{L} \int_0^L \sin \frac{\pi m x}{L} \sin \frac{\pi n x}{L} dx = 0$</p>
<p>13. Частица в одномерной потенциальной яме конечной глубины. Рассмотрим случай одномерного движения частицы в прямоугольной потенциальной яме конечной глубины.  $U = U_0$ при $X < 0, X > L$; $U = 0$ при $0 \leq x \leq L$. Рассм случай, когда энергия частицы $E < U_0$. УШ в областях I, III имеет вид $\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E_0)\psi = 0$; Решение этого ур-ния $\psi = Ae^{\chi x} + B e^{-\chi x}$, $\chi^2 = \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}$, $\chi = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}$. В соотв со стандартными усл. решение в области I, III: $\psi_1 = C_1 \cdot e^{\chi x}$, $\psi_3 = C_3 \cdot e^{-\chi x}$. В области II, УШ: $\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(-E) \psi = 0$. Приходим к решению $\psi_2 = C_2 \sin(kx + \sigma)$ с $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$. В соотв со стандартными условиями пси – ф-ция и его 1-ая производная должны быть непрерывными на границе потенц энергии. (при $x = 0$, при $x = L$). Непрерывность пси – ф-ции приводит к ур-нию: 1) $C_1 = C_2 \sin \sigma$, 2) $C_3 \cdot e^{-\chi L} = C_2 \sin(kL + \sigma)$. Условие непрерывности производной в точке $x = 0, x = L$ приводит к ур-нию: 3) $\chi C_1 = \chi \cdot C_2 \cos \sigma$, 4) $-\chi \cdot C_3 \cdot e^{-\chi L} = k C_2 \cos(kL + \sigma)$. Разделим 1-е ур-ние на 3-е; 2-е на 4-е, получаем: $\text{tg}(\delta) = \frac{\chi}{k}$, $\text{tg}(kL + \delta) = -\frac{\chi}{k}$. С помощью тригонометрических формул: $\sin \delta = \frac{\hbar k}{\sqrt{2mU_0}}$; $\sin(kL + \delta) = -\frac{\hbar k}{\sqrt{2mU_0}}$; То $\arcsin \frac{\hbar k}{\sqrt{2mU_0}} = \frac{\pi - kL}{2}$. Получим трансцендентное ур-е, определяющее возможное знач. k и соотв. энергию частицы $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. Если решить ур-ние графически, то увидим, что число возможных энергетич. уровней дискретного спектра конечное. Должен сущ. как минимум один спектр. Случай $E > U_0$ приводит к непрерывному спектру. Реализуются состояния с любым значением $E > U_0$. Из вида решений ясно, что есть вероятность обнаружения частицы в области за пределами потенц ямы, даже если её энергия $E < U_0$</p>	<p>14. Прохождение частицы через потенциальный барьер Область пространства, где потенц энергия больше, чем в окружающих обл. назыв потенц. барьером. Рассм. потенц. барьер прямоугольной формы.  $U = 0$, при $x < 0, x > L$; $U = U_0$, при $0 \leq x \leq L$; В классич механике частица с энергией $E < U_0$, движущаяся слева направо, с вероятностью 1 отразится от барьера. В обл. III не попадет. Если $E > U_0$ то с вероятностью 1 частица преоделает потенц. барьер и окажется в обл. III. В квантовой механике для частицы с $\forall E$ есть вероятность прохождения барьера и отражение от него. Рассм. случай $E < U_0$. Движение частицы подчиняется УШ: $\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U(x))\psi = 0$; В областях I и II: $\frac{d^2\psi_{1,2}}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi_{1,2} = 0$; где $\psi_1 = A_1 e^{i\alpha x} + B_1 e^{-i\alpha x}$; $\psi_2 = A_2 e^{i\alpha x} + B_2 e^{-i\alpha x}$; $\alpha = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$; $B_3 = 0$, т.к после прохождения барьера частица не будет испытывать препятствия. В обл II ур-ние приобретает вид: $\psi_2 = A_2 e^{\kappa x} + B_2 e^{-\kappa x}$; Должны выполняться стандартные условия => необходимо наложить усл. непрерывности на Ψ- ф-цию и её 1-ую производную в точке $x = 0, x = L$. 1) $A_1 + B_1 = A_2 + B_2$ 2) $A_3 e^{i\alpha L} = A_2 e^{\kappa L} + B_2 e^{-\kappa L}$ 3) $i\alpha A_1 - i\alpha B_1 = \chi A_2 - \chi B_2$ 4) $i\alpha A_1 e^{i\alpha L} = \chi A_2 - B_2 e^{-\kappa L}$ Разделим 1 и 2 на A_1; 3 и 4 на αA_1, введем обозначение $b_1 = \frac{B_1}{A_1}$, $a_1 = \frac{A_2}{A_1}$, ..., $n = \frac{\chi}{\alpha}$, приходим к системе: 1. $1 + b_1 = a_2 + b_2$ 2. $a_3 e^{i\alpha L} = a_2 e^{\kappa L} + b_2 e^{-\kappa L}$ 3. $i - ib_1 = na_2 - nb_2$ 4. $ia_3 e^{i\alpha L} = na_2 e^{\kappa L} - nb_2 e^{-\kappa L}$ Умножим 1-ое уравнение на i и складываем с 3-м, 2-ое уравнение умножаем на i, и вычитаем из него 4-ое. Получаем: $\begin{cases} 2i = (n+i)a_2 - (n-i)b_2 \\ (n-i)a_2 e^{\kappa L} + (n+i)b_2 e^{\kappa L} = 0 \end{cases}$ $b_2 = \frac{(n-i)e^{2\kappa L}}{(n+i)} a_2$; $2i = (n+i)a_2 - \frac{(n-i)^2}{n+i} e^{2\kappa L} a_2$; $a_2 = \frac{2i(n+i)}{(n+i)^2 - (n-i)^2 e^{2\kappa L}}$; $ia_3 e^{i\alpha L} = na_2 e^{\kappa L} - nb_2 e^{-\kappa L}$; $a_3 = \frac{4ine^{-i\alpha L}}{(n+i)^2 e^{-\kappa L} - (n-i)^2 e^{\kappa L}}$; Т.к $\chi L \ll 1$, то $a_3 = \frac{4in}{(n-i)^2} e^{-i\alpha L - \chi L}$ Коэффициент прозрачности, дающий вероятность прохождения частицы через потенц барьер: $D = \left \frac{A_3}{A_1} \right ^2 = a_3 ^2 = \frac{16n^2}{(1+n^2)^2} e^{-2\chi L}$; Обычно полагают: $D = e^{-2\chi L} = e^{-\frac{2L}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}}$; Учли, что $\chi = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}}$</p>	<p>15. Потенциальный барьер произв. формы. Туннельный эффект Рассм. потенц. барьер, форма которого задается ф-цией $u(x)$. (<i>с график</i>) Участок $u(x)$, где $E \geq 0$, разбиваем на N участков ширины Δx. Прохождение налетающее слева частицы с энергией E представим как результат последов. прохождения частицы прямоуго. барьеров ширины Δx и высоты $u(x)$. Коэф. прохождения выделенного участка частицы $D = D_1 \cdot D_2 \cdot \dots \cdot D_N = \prod_{i=1}^N D_i$. Если x и $D \rightarrow 0$, то $D = e^{-\frac{2m}{\hbar} \int_0^x \sqrt{2m(u(x)-E)} dx} = e^{-\frac{2m}{\hbar} \int_0^x \sqrt{2m(u(x)-E)} dx}$ Если x и $D \rightarrow 0$, то $D = e^{-\frac{2m}{\hbar} \int_0^x \sqrt{2m(u(x)-E)} dx}$ x_1 и x_2 - корни ур-ния $U(x) - E = 0$; При прохождении потенц. барьера частицы как бы проходит туннель на высоте E. Поэтому рассм. эффект. назыв туннельным. Он позволяет объяснить ряд важных явлений невозможных с т. зрения классич. теории. 1) Радиоактивный α-распад. На α-частицу в ядре действуют силы сильного взаимодействия и сила Кулоновского отталкивания. На расстояниях меньшего пробол. сильное взаимодействие. Из опыта можно опред. U_{max}. При α-распаде набл. α- частицы с энергией $E < U_{max}$; Их возник-е объясняется прохождением потенц. барьера. 2) два мех. проводника разделен тонким слоем диэлектрика и поместим его в эл. цепь. Будет набл. проходж. эл. тока, экспоненци-но зависящую от толщины l диэлектр. То набл. туннельный эффект, невозможный с т. зрения классич. теории.</p>	<p>16. Гармонический осциллятор. Частицу, движущ в поле квазиупругой силы $F_x = -kx$, называют гарм. осциллятором. Рассм. одномерную задачу: $k = m\omega^2$, тогда $U = \frac{kx^2}{2} = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$. УШ для стац сост: $\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right) \psi = 0$. Введем: $\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x$, $\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}$ То $\frac{d^2\psi}{d\xi^2} + (\lambda - \xi^2)\psi = 0$. При $E \rightarrow \infty$ стандарт. усл асимметрич решение должно иметь вид $\psi = \text{Ce}^{-\frac{\xi^2}{2}}$. Поэтому точное решение будем искать в виде $\psi(\xi) = \text{Ce}^{-\frac{\xi^2}{2}} \theta(\xi)$, $\theta(\xi)$ — неизвестная ф-я которую найдем решая $\frac{d^2\theta}{d\xi^2} + (\lambda - \xi^2)\theta = 0$. После подстановки ψ в это ур-е приходим к ур-ю $\frac{d^2\theta}{d\xi^2} - 2\xi \frac{d\theta}{d\xi} + (\lambda - 1)\theta = 0$. Решение этого ур-я будем искать в виде разложения в ряд Тейлора $\theta(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^k$; $\sum_{k=0}^{\infty} k(k-1)a_k \xi^{k-2} - 2 \sum_{k=0}^{\infty} k a_k \xi^{k-1} + (\lambda - 1) \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^k = 0$; $\sum_{k=0}^{\infty} (k(k-2) + 2) a_k \xi^{k-2} - 2 \sum_{k=0}^{\infty} k a_k \xi^{k-1} + (\lambda - 1) \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^k = 0$; Ур-е будет выполняться при любом ξ, если суммарные коэф. при ξ^k равны 0, т.е. $(k+2)(k+1)a_{k+2} - 2k\alpha a^2(k-1)a_k = 0$. Приходим к рекуррентному соотн $a_{k+2} = \frac{2k-1}{(k+2)(k+1)} a_k$. Поведение отношения двух соседних коэф. разложения при $k \rightarrow \infty$: $\frac{2k}{k^2} = \frac{2}{k}$ совпадает с поведением отношения двух соседних коэф. разложения ф-ции $e^{\xi^2} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\xi^k}{k!}$. $b_{k+2} = \frac{(\frac{k}{2})!}{(\frac{k+1}{2})!} \rightarrow \frac{2}{k}$ То ф-ции ведут себя одинаково на бесконечности: $\theta(\xi) = e^{\xi^2}$, $\psi = e^{\xi^2}$, при больших ξ растет неограниченно, то она не удовл. станд. условиям. Но при определенных знач λ бесконечный ряд для θ обращается в конечный полином. Это будет происходить, если при некотором $k=n$ числитель рекур. соотношения обратиться в 0, $2n - \lambda + 1 = 0$, тогда $a_n \neq 0$, $a_{n+2} = 0$. Это происходит при $\lambda = 2n+1$; Этим знач λ_n в соотв. с $\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}$ соотв. знач энергии $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$. Только эти знач энергии возможны. Спектр энергии дискретен. Уровни расположены на одинаковом раст друг от друга. Мин. знач энергии: $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} \neq 0$, в отличие от класс. гарм. осциллятора. Рассеивание происходит на колебаниях кристалл. решетки, амплитуда k-х не обращается в 0 при $T \rightarrow 0$, то интенсивность рассеянного излучения стремится к ненулевому знач. При переходе от одного энерг. уровня происходит испускание (поглощение) фотона. Правила определения возможных переходов назыв правилами отбора. Возможны только переходы между соседними уровнями. Правило отбора $\Delta n = \pm 1$. Полиномы $\theta_n(\xi)$, соотв. λ_n, выражаются через известные полиномы Чебышева – Эрмита $H_n(\xi) = C \theta_n(\xi)$. То возможные сост гарм. осциллятора описываются ψ-ф-циями: $\psi_n(\xi) = \text{Ce}^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi)$, где C — коэф. нормировки.</p>

<p>17. Постулаты квантовой механики</p> <p>I. Основные положения квантовой механики можно определить след образом: сост. движения частицы полностью описывается пси-ф-ией $\psi(\vec{r}, t) <=> (A_x, A_y, A_z)$; Подчиняется УШ и стандартным усл. $\psi(\vec{r}, t)$ для \forall момента времени соотв. физич принцип суперпозиции сост, то множество пси-ф-ций образует комплексное линейное векторное пространство, где каждый вектор описывает некоторое возможное сост частицы. Для двух произвольных пси-ф-ций можно ввести скалярное произведение: $(\psi_1, \psi_2) = < \psi_1 \psi_2 > = \int_V \psi_1^* \psi_2 dV$; $C=60 < \psi_1 \psi_2 > = < \psi_2 \psi_1 >^*$ II. Каждой физич величине классич механики в квантовой механике сопоставл линейный самосопряженный оператор. Оператором- правило в соотв. с которым ф-циям из некоторого множества сопоставл ф-ции из множества $\hat{Q} = x + \frac{a}{dx}$; $\hat{Q}\psi = x\psi + \frac{a\psi}{dx}$. Линейным оператором назыв оператор. Если $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$, то операторы не коммутируют. Степени не коммутативности определяются коммутатором оператора $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = [\hat{A}, \hat{B}]$. Если выполняется $\hat{Q}\psi = q\psi$, где q – число, то пси явл собств ф-цией оператора Q с собств знач q. Спектр может быть дискретным, непрерывным и их объединением. В случае, дискретного спектра, собств знач можно пронумеровать. То можно записать $\hat{Q}\psi_n = q_n\psi_n$. Для собств. ф-ции дискретного спектра $< \psi_n \psi_n > = \int_V \psi_n^* \psi_n dV$ конечна. Поэтому, пользуясь произвольностью выбора нормиров. коэф., собств. функции дискретного спектра можно нормировать, $< \psi_n \psi_n > = 1$. Оператор \hat{Q} назыв самосопряженным, если выполняется условие $\int_V \psi_1^* \hat{Q} \psi_2 dV = \int_V (Q \psi_1^*) \psi_2 dV$; $< \psi_1 \hat{Q} \psi_2 > = < \hat{Q} \psi_1 \psi_2 > = < \psi_2 \hat{Q} \psi_1 >^*$; Самосопряженные операторы – эрмиты. Они обладают важными св-вами, благодаря которым они исп. для описания динамич переменных: 1) Собств знач самосопряженного оператора действ числа. 2) Собств ф-ции, отвечающие не равному друг другу. 3) Собств. ф-ции самосопрж оператора образуют полную ортонормир сист. Любая пси-ф-ция может иметь вид $\psi = \sum a_n \psi_n$ коэф. разложения в силу ортонорм-сти базиса $a_k = \int \psi^* \psi_k dV$; Постулат 3: В сост пси при измерении числового знач динамич переменной, представляемой \hat{Q} с некоторой вероятностью мы будем получать знач, совпадающее с собств знач. $\hat{Q} - q_1, q_2, \dots$. Вероятность получить знач. q_n: P_n = a_n ², a_n – коэф. разложения пси-ф-ции состояния по ортонорм. базису ψ_n. $\psi = \sum a_n \psi_n$; $a_n = \int \psi \psi_n^* dV$. Если сист. находится в сост. ψ_n, то с вероятностью P = 1 при измерении мы получим величину, равную q_n. В данном сост динамич переменная имеет опред. знач. Среднее знач q вычисляется $< q > = \int \psi^* Q \psi dV$. В классич механике сост. системы описывается с помощью динамич переменных. Основная задача описания движения в классич механике состоит в зависимости от времени динамич. переменной. В квантовой механике можно говорить лишь о вероятности того или иного знач динамич переменной и о ее среднем знач.</p>	<p>18. Операторы физическ величин</p> <p>Операторы физ величин должны быть линейными, самосопряженными. Их выражения определяются из наводящих соображений постулата квантовой механики в соотв классической механики. 1) Оператор координат - \hat{x}; среднее знач координаты x в соотв со смыслом пси-ф-ции: $\langle x \rangle = \int x dP_x = \int \psi^* x \psi dv$; То $\hat{x} = x, \hat{x}\psi = x\psi; \hat{y} = y, \hat{z} = z$; Очевидно, что оператор координат линейный и эрмитый; 2) Оператор проекции импульса, $\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$; $\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, \hat{p}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}, \hat{p}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$; 3) Оператор Гамильтона - \hat{H}; В классич механике Гамильтониан назыв полную энергию, выраженную через импульс и координаты частиц $u = \frac{p^2}{2m} + u(\vec{r})$. При переходе к квантовой теории следует классич динамические переменные заменить их операторами: $\hat{u} = -\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}) + u(x, y, z)$, получим оператор Гамильтона. Для него задача на собственное знач $\hat{H}\psi = E\psi$ совпадает с УШ для стационарных состояний. Этот оператор определяет эволюцию физич систем в соотв с временным УШ: $i\hbar\frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi$.</p>	<p>19. Условие одновременной измеримости различных физических переменных.</p> <p>При измерении динамич. переменной получается вполне опред. знач. лишь в том случае, когда пси-ф-ии системы явл. собственной ф-ей соотв оператора. Собств. ф-ции различных операторов, отвечающие разным физич. величинам, не совпадают. Поэтому различные переменные не могут при измерениях одновременно иметь опред. числовые значения. Необходимым и достаточным условием того, что две динам. переменные могут одновременно иметь определенные знач явл. коммутативность этих динам. переменных. Необходимость: пусть две динам. переменные могут одновременно иметь опред. знач, то операторы этих величин имеют общие собств. ф-ии ψ_n: $\hat{Q}\psi_n = q_n\psi_n$; $\hat{F}\psi_n = f_n\psi_n$. Ясно, что $\hat{Q}\hat{F}\psi_n = f_n q_n \psi_n$; $\hat{F}\hat{Q}\psi_n = q_n f_n \psi_n$. То на собств. ф-циях, образующие полный набор, ф-ии коммутируют $\hat{Q}\hat{F} = \hat{F}\hat{Q}$; Достаточность: Пусть $\hat{Q}\hat{F} = \hat{F}\hat{Q}$. Собств. ф-ии $\hat{Q}\psi_n = q_n\psi_n$, тогда: $\hat{Q}\hat{F}\psi_n = \hat{F}\hat{Q}\psi_n \Rightarrow \hat{Q}(f_n\psi_n) = q_n(f_n\psi_n)$ $\hat{F}\psi_n : \hat{F}\psi_n = f_n\psi_n$ – собств. ф-ия \hat{F}. Величины q и f одновременно измеримы.</p>	<p>20. Сootношение неопределенностей</p> <p>Вычислим коммутатор операторов $\hat{x} = x$ и $\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$. $[\hat{p}_x, \hat{x}]\psi = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(x\psi) + i\hbar x\frac{\partial \psi}{\partial x} = -i\hbar\psi \Rightarrow [\hat{p}_x, \hat{x}] = -i\hbar$. Операторы \hat{p}_x, \hat{x} не коммутируют \Rightarrow не могут иметь общих собств ф-ций, поэтому эти 2 величины при одновременном измерении не могут давать определенных знач. При измерении координаты частицы приготовлены в Ψ мы будем получать разбросанное около некоторого среднего знач $< x > = \int \Psi^* x \Psi dV$; Степень отклонения от среднего знач хар-ся дисперсией $< (\Delta x)^2 = < (x - < x >)^2 >$; аналогично определяется дисперсия для проекций импульса. Доказывается, что для любого состояния частицы произведение дисперсии координаты и проекции импульса равно: $< (\Delta x)^2 > < (\Delta p_x)^2 > \geq \frac{\hbar^2}{4}$; Обычно соотношение неопределенностей записывают в виде: $\sqrt{< (\Delta x)^2 >} \geq \sqrt{< (\Delta p_x)^2 >} \geq \frac{\hbar}{2}$ – соотношение Гейзенберга; $\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} (\hbar, \hbar, \frac{\hbar}{2})$; Соотношение неопределенностей - следствие действеного хар-ра микрочастиц. Оно показывает, что импульс и одноименная координата частицы не могут одновременно иметь опред значения и минимальное возможное знач произведения их дисперсий определяется с постоянной Планка. Это говорит о том, что соотношения неопред не явл следствием несовершенства наших измерительных приборов.</p>
<p>21. Оператор момента импульса</p> <p>В классич механике проекции вектора момента импульса $\vec{L} = [\vec{r}, \vec{p}]$ равны $L_x = yz - yz, \dots$ Чтобы получить соотв квантово-механич операторы, необходимо заменить входящие в формулу физич величины на ихственные операторы проекции момента импульса: $L_x = -i\hbar(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y})$, аналогично для \hat{L}_y, \hat{L}_z. Перестановочные соотношения для этих операторов $[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z$, говорят о том, что проекции момента импульса на различные направления не коммутируют и одновременно могут иметь определённые знач. Но коммутирует оператор квадрата момента импульса $\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$ и любой оператор проекции момента импульса направления $\hat{L}_x, [\hat{L}^2, \hat{L}_x] = 0$; То \hat{L}^2 и \hat{L}_x имеют общие собств ф-ции и одновременно измеримы. Общие собств ф-ции найдём из ур-ния: $\begin{cases} \hat{L}_x \psi = L_x \psi \\ \hat{L}^2 \psi = L^2 \psi \end{cases}$ в сферической системе координат. Ур-ния решают методом разделения переменных, положив: $\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)P(\theta)\Phi(\varphi)$; Подстановка этого выражения в 1-ое ур-ния системы приводит к ур-ниям: $-i\hbar\frac{\partial \Phi}{\partial \varphi} = L_x \Phi$; $\Phi = c \cdot e^{i\frac{L_x}{\hbar}\varphi}$; Решение должно удовлетворять стандарт усл, в частности усл однородности: $\Phi(\varphi + 2\pi) = \Phi(\varphi)$, $\Rightarrow i\frac{L_x}{\hbar}(\varphi + i2\pi m)$, m=0, $\pm 1, \pm 2$; В результате получим возможное знач в проекции момента импульса: $L_x = \hbar m$, m=0, $\pm 1, \pm 2$. Спектр знач дискретен в отличии от классич механики. 2-ое ур-ние системы после подстановки в него $\varphi = RP\Phi$; Ур-ние для приобретает вид известный в математич физике для присоединенных полиномов Лежандра P_m^m. Решение, удовлетворяющее стандарт усл конечной ψ-функции суц при l=0, 1, 2, 3, ..., m=0, $\pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$. Квадрат момента импульса: $L^2 = \hbar^2 l(l+1)$, $L_z = \hbar m$. Он как и L_x имеет дискретный спектр. Общие собств ф-ции \hat{L}^2, \hat{L}_z имеют вид: $\psi_{lm} = R(r)P_m^m(\cos\theta)e^{im\varphi} = R(r)Y_m^m(\theta, \varphi)$. Эти ф-ции удовлетворяют ур-ниям: $L_x \psi_{lm} = \hbar m \psi_{lm}$ и $\hat{L}^2 \psi_{lm} = \hbar^2 l(l+1) \psi_{lm}$</p>	<p>22. Сложение моментов</p> <p>В классич механике момент импульса системы двух моментов L_1 и L_2 равен: $\vec{L} = \vec{L}_1 + \vec{L}_2$; Пусть две квантовые мех частицы обладают моментами и проекциями на Oz задаваемые квантовыми числами. То момент системы и его проекция будут определяться квантовыми числами $L=L_1+L_2, L_1+L_2+1; L_1+L_2-2, \dots L_1-L_2$; m=m₁+m₂</p>	<p>23. Квантово-мех модель атома водорода</p> <p>Гамильтониан УШ с учетом зависимости потен энергии электрона в атоме водорода зависит только от r. В сферич сис коорд имеет вид: $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r}) + \frac{1}{r^2}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}) - \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$; z=1,2,3; Видно, что гамильтониан коммутирует с операторами $\hat{L}^2 = -\hbar^2(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2})$ и $\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$. То $\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_z$ могут иметь общие собств ф-ции. Эти собств ф-ции будут описывать сост электрона с одновременно опред знач энергии моментами импульса (E, L^2, L_z). Эти знач и пси-ф-ции сост находятся из решения сист уравн: $\hat{H}\psi = E\psi, \hat{L}^2\psi = L^2\psi, \hat{L}_z\psi = L_z\psi$. можно заменить $\frac{1}{\hbar^2}\hat{L}^2 \rightarrow \frac{1}{\hbar^2}\hbar^2 l(l+1)$; В результате 1-ое ур-н сист переходит в диф ур-ние для R(r). Решение выражается через обобщенные полиномы Лагерра. Получ решения удовлетв стандартным усл при след знач энергий. $E_n = -\frac{mz^2e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2\hbar^2n^2}$, n=1,2,3... Ф-ция R(r) зависит от двух квантовых чисел n,c=R_{nc}(r) Состояние, описыв электрон с опред знач энергии E_n, квадрата момента импульса L^2, проекции L_z: $\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)$; В этом сост энергия $E_n = -\frac{mz^2e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2\hbar^2n^2}$ $L^2 = \hbar^2 l(l+1), L=0, 1, \dots, K-1$ Проекцией момента импульса на ось z: $L_z = \hbar m$, m=0, $\pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$; n-главное квант число, L-орбитальное квант число, m-магнитное квант число. Состояние с наим энергией, когда n=2, описыв Ψ_{100} – одно состояние; n=2: $\Psi_{200}, \Psi_{210}, \Psi_{21-1}, \Psi_{21+1}$ 4 состояния. Если одному знач энергии отвечает несколько различных состояний, то это знач. энергии назыв вырожденным. Число линейно независимых сост: $K = \sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m=-l}^l m = n^2$; При переходе электрона с одного энергетич уровня на др испускается или поглощ фотон, частота которого: $\omega = \frac{E_n - E_m}{\hbar} = \frac{mz^2e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2\hbar^3} (\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}) = R(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2})$; Фотон обладает собств моментом импульса $L = \hbar$ и в соотв с законом сохр момента импульса для электрона совершающ переход с одного уровня на др, должно выполняться правило отбора $\Delta L = \pm 1$. Видно, что излучаемые частоты $\omega_{nm} = T(m) - T(n)$ представляют собой разность двух термов $T(m) = \frac{R}{m^2}, \hat{H}\psi_{nlm} = E_n\psi_{nlm}$; $\hat{L}^2\psi_{nlm} = \hbar^2 C(C+1)\psi_{nlm}$; $\hat{L}_x\psi_{nlm} = \hbar m\psi_{nlm}$</p>	<p>24. Спектр щелочных металлов. Спин электрона</p> <p>Спектр щелочных металлов состоит из неск. спектров, которые обусловлены переходом внеш. валентных электронов с одного энергетического уровня на другой. Энергия валентных электронов зависит от главного квантового (n) и азимутального (l) чисел. Зависимость возникает из-за действия, помимо кулоновского поля ядра, не кулоновского поля др. электронов. При l↑ энергия электрона с фикс. знач n тоже ↑ (=> l нужно учитывать в схемах). Возможные переходы определ. правилом отбора $\Delta l = \pm 1$. Частоты излучения равны разности 2х термов: $T(n) = \frac{R}{(n+a)^2}, T(m) = \frac{R}{(m+a)^2}$, где a ридберговская поправка (зависит от l). Спектр Me – это линии расщеплений (возникают из-за расщеплений энерг. уровней): дублеты (2 линии), триплеты, квартеты и т.д. Линия, состоящая из неск. близко расположенных линий, – мультиплет. (Аудсмит и Уленбек) спин – собственный момент импульса e⁻ (не связан с движением электрона по орбите и вращением эл-на вокруг своей оси). В релятив. теор. спин и m являются св-вами частицы. Собств. момент ч-цы: $L_s = \hbar\sqrt{s(s+1)}$, где $s = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots$ – квантовое число. Проекция на ось: $L_{sz} = \pm \hbar m_s, m_s = s, s-1, s-2, \dots, -s$. Для e⁻: $L_{sz} = \pm \hbar/2$. Полный механич момент: $L_s = \hbar\sqrt{j(j+1)}$, где $j = l+1, l+ s - 1, \dots, l - s$. Если e⁻ обладает орбитальным моментом задаваемым l, то его полный момент принимает 2 значения $c\ j = l + \frac{1}{2}, j = l - \frac{1}{2}$. Мультиплетность спектральных линий объясняется наличием спина у электрона.</p>

<p>25. Опыт Штерна и Герлаха</p> <p>Электрон согласно классич теории, движущийся по круговой орбите вокруг ядра, обладает механич моментом $L = mvr = m\omega r^2$. Т.к. электрон – заряженная частица, то по орбите протекает электрич ток, сила которого $I = \frac{q}{t} = \frac{e}{T}$, соответственно магнитный момент $P_m = \mu = \frac{e}{2m}I$. Механич магнитный момент равняются $\mu = -\frac{e}{2m}l$. Отношение $\frac{\mu}{l} = -\frac{e}{2m}$ назыв гармоническим отношением. В опытах Штерна и Герлаха исследовалось влияние магн поля на магн момент атома. Влияние определяется действием силы F на атомы $\vec{F} = -\nabla W = -\nabla(\mu \vec{B})$; $\vec{F}_x = -\mu \frac{\partial \psi}{\partial x} \cos \alpha$, где угол α – угол между направлением магн полем и магн моментом, по классич теории он может быть любым, поэтому после прохождения направление движения частицы с магн полем на экране должна наблюдаться сплошная полоса. Но в опыте наблюдается несколько узких, симметрично расположенных полос. Кол-во полос определяется химич элементом. Результаты говорят о том, что проекция магн момента $\mu \cos \alpha = \mu_z$ может иметь только некоторые определенные знач, квантуется. Явление назыв явлением пространственного квантования. Опыты позволили определить киромагн отношения для (μ_B, механич, магн) моментов. Оказалось, что $\frac{\mu_B}{l_B} = -\frac{e}{m} = -2 \frac{e}{2m}$. Оно в 2 раза больше, чем для орбитальных моментов.</p>	<p>26. Механический и магнитный момент атома</p> <p>Мех. и магн. момент атома есть сумма соотв моментов электронов и ядра; обычно моментами ядра пренебрегают. Орбит. мех. момент электрона $L_l = \hbar \sqrt{l(l+1)}$; Орбит. магн. момент $\mu_l = -\frac{e}{2m}L_l = -\frac{eh}{2m} \sqrt{l(l+1)} = \mu_B \sqrt{l(l+1)}$; $\mu_B = \frac{eh}{2m}$ – магнетон Бора. Спиноый мех. момент $L_s = \hbar \sqrt{s(s+1)}$; $\mu_s = -\frac{e}{m}L_s = -L_s \mu_B \sqrt{s(s+1)}$. Как следует из эксперим., спиновый магн. момент $L_s = -2\mu_B \sqrt{s(s+1)}$; Гиро-магн. отношение для спиновых моментов электрона в два раза больше гиро-магн отношения для орбитальных моментов. Момент – векторная сумма орбит и спиновых моментов ег электрона. Момент ядра не учитывается. Сложение моментов выполняется в соотв. с квантово-мех. правилами. В зависимости от сил взаимодействия между орбит. и спиновыми моментами отдельных электронов различают 2 способа сложения моментов: 1) Обычно орбит. моменты электронов вз-вуют друг с другом сильнее, чем со спиновыми моментами, которые в свою очередь вз-вуют друг с другом сильнее, чем с орбит. моментами. Тогда складывают по отдельности орбит. и спиновые моменты L и квантовое число спинового момента атома S. Полный момент атома опред. квантовым числом J, принимающим знач. от суммы до разности L+S, L+S+1, ..., L – S . Полный момент $L_J = \hbar \sqrt{J(J+1)}$; Соотв. состояние атома обознач. след. образом $2^{2s+1}L_J$. Очевидно, что орбит. магн. момент атома $\mu_L = -\mu_B \sqrt{L(L+1)}$; $\mu_S = -2\mu_B \sqrt{s(s+1)}$. Полный момент атома $\mu_J = -\mu_B g \sqrt{J(J+1)}$; Множитель Ландела: $g = 1 + \frac{l(l+1)+s(s+1)-L(L+1)}{2J(J+1)}$ возникает вследствие различных гиро-магн. отношений для орбит. и спиновых моментов назыв. LS – связью. 2) В случае тяжёлых атомов вначале складывают орбит. и спиновые моменты отдельных электронов и получают полный момент электрона $L_J = \hbar \sqrt{J(J+1)}$. Далее складывают эти моменты: $L_J = \hbar \sqrt{J(J+1)}$. Это j-j-связь.</p>	<p>27. Эффект Зеемана</p> <p>Расщепление энергетич уровней атома при его помещении в магнитное поле называеься эффектом Зеемана. Расщепление уровней приводит к расщеплению спектральных линий. Образуются мультиплеты. Расщепление уровней обусловлено тем, что атом в магнитном поле приобретает дип. энегию $\Delta E = -(\vec{M}, \vec{B}) = \mu_B g m_J B$. $m = J, J-1, \dots, -J, -J-1$ – знач. Уровень расщепления на $2J+1$ знач. Рассмотрим простейший случай. Различают простой и сложный эффект Зеемана. Простой возникает, если S = 0. Рассмотрим переход $^3S_0, ^3S_0 \leftarrow ^1P_1$. При включении магнитного поля будут наблюдаться 3 линии излучения с частотами: $W_0, W_0 \pm \Delta W$, $\Delta W = m_J \frac{B}{\hbar}$. Сложный эффект Зеемана наблюдается при S $\neq 0$, когда изначально спектральные линии имеют тонкую структуру.</p>	<p>28. Принцип тождественности. Принцип Паули. Периодическая система элементов</p> <p>В классич механике одинаковые частицы неразличимые по своим физич св-вам можно различить, ведя наблюдение за их движением по траекториям. В квантовой механике понятие траектории частицы не имеет места. Поэтому следить за движением микрочастиц невозможно → невозможно различить одинаковые частицы. Это принцип тождественности (принцип неразличимости) одинаковых частиц. Пси-ф-ция, описыв. сост системы двух одинаковых частиц, должна быть такой, чтобы при перестановке частиц не изменился физич св-ва сист: $\Psi(\vec{r}_1, \sigma_1, \vec{r}_2, \sigma_2) ^2 = \Psi(\vec{r}_2, \sigma_2, \vec{r}_1, \sigma_1) ^2$. Проведя повторную перестановку, мы должны прийти к первонач сост и усл $a^2 = 1 \rightarrow a = \pm 1$. Частицы с целым спином описываются симметричные пси-ф-циями. Эти частицы называются базона. Частицы с полупелым спином описывается антисимметричные пси-ф-циями. а = -1. Их называют фермионами. Для фермионов выполняется принцип Паули. В одном и том же состоянии не могут находиться одновременно два электрона. В системе тождественных фермионов не может быть двух частиц, находящихся в одном и том же состоянии. Принцип Паули объясняет почему все электроны атома не переходят в основное состояние. Состояние электрона в атоме может характеризоваться четырьмя квантовыми числами: n, l, m, m_s. Пси-функция соответствующего состояния обозначается как Ψ_{nlmm_s}. Электроны, стремясь занять состояния с наименьшей энергией, подчиняясь принципу Паули, последовательно заполняют оболочки.</p>
<p>29. Статистический вес. Энтропия</p> <p>Твердые, жидкие и газообразные тела, излучение в замкнутой полости в проводнике представляют собой совокупность огромного количества микрочастиц. Наиболее подробное описание таких систем задается описанием координат и импульсов всех частиц, образующ сист. Удобно использовать шестимерное фазовое пространство, координатные оси которого $OX, OY, OZ, p_x, p_y, p_z$. Состояние микрочастиц задается значениями координат и импульса. Микросостояние системы, состоящей из N частиц задается N соотв точками в фазовом пространстве. Однако микрочастицы – квантовые объекты. В силу соотношения неопределенности нельзя одновременно указать опред знач координаты и проекции импульса. Из соотношения неопределенностей следует, что все точки, лежащие в ячейке фазового пространства объемом: $\Delta \Gamma = \Delta x \Delta y \Delta z \Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z = (2\pi\hbar)^3$; соотв одному и тому же состоянию. В соотв с этим фазовое пр-ство разбивают на ячейки объема. Указать микросост сист квантово-механич частиц это значит указать в каких ячейках находится эта частица. Описание состояния микросистемы с помощью задания микросостояния ввиду огромного кол-ва частиц входящих в нее избыточно и нереально. Поэтому сост сист описывают с помощью нескольких параметров, которая явл усредненными по времени ф-ции от микропараметров. Одно и тоже макросост может быть реализовано несколькими микросост. Число различных микросост соотв некоторому макросост назыв статистическим весом – Ω. Вероятность обнаружения частицы в любой ячейке одинакова. То формулируется принцип равновероятности: все допустимые микросостояния замкнутой системы равновероятны. Опыт показывает, что замкнутая система со временем переходит в равновесное состояние. Пусть P_1 – вероятность одного микросостояния. Вследствие постулата равновероятности, вероятность нахождения системы в данном макросостоянии $P = \Omega P_1$. Ясно, что равновесному сост отвечает сост с макс знач статистического веса – Ω_{max}; Это огромная величина $\Omega_{max} = 10^{6.5-10^{24}}$. Поэтому для одного моля O_2: $\Omega_{max} = 10^{6.5-10^{24}}$. Поэтому используем энтропию: $S = k \ln \Omega$. Энтропия, в отличие от статистического веса, является аддитивной величиной и имеет обозримые числовые знач. Замкнутая система стремится перейти в наиболее вероятное сост. Равновесному состоянию отвечают макс знач статистического веса и энтропии.</p>	<p>30. Распределение Ферми-Дирака</p> <p>Одной из осн задач статистич физики явл з-н распределения частиц по разным квантово-механическим сост. Пусть имеется замкнутая сист практически, не взаимодейств N фермионов – идеальный ферми-газ. Фермионы могу принимать сост: $E_1, E_2, \dots, E_{l_i}, \dots$ число сост. с энергией $E_i \rightarrow Z_i$. Число частиц с энергией $E_i \rightarrow N_i$. С теч времени числа N_i меняются, если сист находится в равновесном сост, распределение ег частиц по энергиям хар-ся средним по времени числом частиц, приходящих на одно квантовое механич сост $<n_i> = \frac{N_i}{Z_i}$. Ясно, что равновесное сост итвч. ему частица опред. из усл максимума статистич веса Ω и энтропии S. Выделим во всей системы частиц, подсистему из N частиц. Они могут находиться в Z_i сост, упорядоч. в виде строки клеток. Необходимо определить число вариантов распределения N_i частиц по Z_i состояний. Все варианты возможны, если $Z_i!$ перестановок сост. Но в силу принципа тождественности надо исключить $N_i!$ перестановок тождественных фермионов. Исключаем и все возможные перестановки пустых сост ($Z_i - N_i$)! То $\Omega_i = \frac{Z_i!}{N_i! \cdot (Z_i - N_i)!}$. Для всей системы: $\Omega = n_i \frac{Z_i!}{N_i! \cdot (Z_i - N_i)!}$, $S = k \sum_i (\ln Z_i! - \ln N_i! - \ln (Z_i - N_i)!) = \dots$ используем формулу Стирлинга: $\ln N! = \ln 1 + \ln 2 + \dots; \ln N = \int_1^N \ln x dx = N \ln N - n + 1$; Замкнутая сист Стирлинга с теч. времени перейдет в равновесное сост, когда параметры сист не будут меняться. Этому сост. соотв. максимуму энтропии, то будет выполняться усл: $dS = \sum_i \frac{dS}{dN_i} dN_i = 0$; Следует учесть, что: $\sum N_i = N = \sum dN_i = 0$ и $\sum E_i N_i = E \Rightarrow \sum E_i dN_i = 0$; Эти усл говорят, что dN_i является не независимой, поэтому мы ищем условия максимума. Используем метод множителей Лагранжа: $F = S + \lambda \sum dN_i - \beta \sum E_i N_i$; и $dF = \sum \frac{dF}{dN_i} dN_i$; Потребуем, чтобы коэффициент при dN_1, dN_2 равнялись нулю. Исчезнут dN_1, dN_2 останутся только независимые dN_3, dN_4, \dots поэтому $dF = 0$ при $\frac{dF}{dN_i} = \frac{dS}{dN_i} + \alpha - \beta E_i$; $i = 3, 4, 5, \dots$ Усл $\frac{dF}{dN_i} = 0$ достигается. Получ. усл для $i = 1, 2$ совпадают с усл. $i = 3, 4, \dots$ Подставив в эти усл. выражение для S: $k \ln N_i - 1 + 1 + \ln (Z_i - N_i) + 1 - 1 + \alpha - \beta E_i = 0$; $e^{\beta E_i - \alpha} = \frac{1 - N_i}{Z_i - N_i}$. Введем среднее по времени число частиц с энергией E_i, приходящ на одно сост: $<n_i> = \frac{N_i}{Z_i}$. Оно хар-ет распределение частиц по энергии: $<n_i> = \frac{1}{e^{\beta E_i - \alpha} + 1}$; Коэф α и β находятся из усл: $\sum N_i = N$; Доказыв, что $\beta = \frac{1}{T}$. Вводится $\mu = \frac{\alpha}{\beta}$. В результате получаем распр. Ферми-Дирака: $<n_i> = \frac{1}{e^{\frac{E_i - \mu}{kT}} + 1}$ Выражение получаем с учетом принципа тождественности и принципа Паули. Для базона принцип Паули отсутствует, поэтому необходимо считать все перестановки сост. В результате для базонов справедливо распределение Бозе-Эйнштейна.</p>	<p>31. Квантовая теория свободных электронов</p> <p>Согласно модели свободных электронов валентные электроны атома металла могут свободно перемещаться по всему объему образца. Валентные электроны обуславливают электропроводность металла, их назыв электронами проводимости. Рассм. образец металла в виде куба L×L×L. Рассм. модель следует считать, что потенц энергия электрона: U=0 при 0<x<L; 0<y<L; 0<z<L; U=∞ вне образца. Тогда вне образца $\psi=0$, то в пределах образца движения опред. УШ. $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = E \psi$. Ур-ние решают методом разделения переменных: $\psi(x,y,z) = \Psi_1(x) \Psi_2(y) \Psi_3(z)$. Подставив это ур-ние в УШ и разделив, получаем $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi_1}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi_2}{\partial y^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi_3}{\partial z^2} = E \psi$. Сумма 3-х ф-й, зависящих от 3-х разных независимых переменных, равна постоянной, поэтому ф-ции пост: $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi_i}{\partial x_i^2} = E_i$. Получили 3 одномерных УШ для частицы в бесконечно глубокой одномерной потенц. ямы. Их решения имеют вид: $\Psi_i = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin k_i x, \dots$. Искомое решение имеет вид: $\psi(x,y,z) = \left(\frac{2}{L}\right)^{\frac{3}{2}} \sin k_1 x \sin k_2 y \sin k_3 z$. Соотв знач энергий $E = E_1 + E_2 + E_3 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)$. Энергия электрона квантуется ввиду близкой распол-сти уровней. Спектр энергии имеет квазинепрерывный хар-р. Найдем число состояний $Z_E < E$. Каждому сост. отвечает точка в пространстве с коорд. $n_1, n_2, n_3 = 1, 2, 3, \dots$ т.к. энергия $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} n^2$, то искомое число сост. равно произведению числа точек первой октанте сферы радиуса $n = \frac{(2m)^{3/2} E^{3/2}}{\pi \hbar}$. Умножим на g=2 вследствие двух проекций спина у электрона. $Z_E = g \cdot \frac{1}{8} \cdot \pi^2 \frac{(2mE)^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} = \frac{(2mE)^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3}$. Число сост. с энергией, лежащей в $E, E+dE$ равно: $\frac{(2m)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E} dE$. Пусть n- концентрация валентных электронов, N=$V n$- число валентных электронов в образце. T→0 эти электроны будут стремиться занять сост. с наим. знач. энергиями. С учетом принципа Паули состояние может занять только 1 электрон. Поэтому при T=0 электроны будут последов. занимать сост по одному, начиная с самой низкой энергии. При некотором знач энергии $E_F(0)$- энергия Ферми, заполнение энергии закончится $nV = \frac{(2m)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} E_F(0)^{3/2} V$. Т. о. энергия Ферми $E_F(0) = \frac{\hbar^3}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3}$. Ср энергия: $<E> = \frac{E}{N} = \frac{3}{8} E_F(0)$. Ср энергия соотв температуре T = $\frac{2}{3k} <E>$. Распр. электронов представляет собой участок параболы. При E > 0 граней, $\frac{dN_E}{dE}$ становится плавной. Только малая доля валентных электронов может участвовать в тепловом движении. Поэтому валентные электроны практич не дают вклад в теплоемкость металла. Для выяснения E_F рассм. распределение Ферми-Дирака. При малых T, когда $E_i < m \rightarrow <n_i> = 1, E_i > m \rightarrow <n_i> = 0$; Из сравнения двух графиков получаем: $m = E_F(0)$</p>	<p>32. Элементы зонной теории твердого тела</p> <p>Модель свободных электронов явл крайней группой. При взаимодействии с ядром другими электронами учитываются в рамках в зонной теории твердого тела. Предполагается: 1) при описании движения электрона атомные ядра ввиду их большой массы рассм как неподвижные источники поля, действ на электроны. 2) расположение ядер в пространстве считается строго периодическим. Они размещаются в узлах идеальной решетки кристалла. Для любого кристалла сущ 3 линейно зависимых атома $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$, таких что весь кристалл можно представить как последоват повторение, построенного на этих векторах параллелепипеда, назыв элементарной ячейкой. 3) Система электронов, взаимодейств с атомным ядром и друг с другом по закону Кулона заменяется сист независимых электронов, движущихся в потенц поле, которое складывается из поля атомных ядер и некоторого эффективного поля, приближенно описывающее взаимодействие между электронами. В рамках этих описывается стац УШ: $-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U(\vec{r}) \psi = E \psi$. В силу периодичности строения кристалла потенц энергия должна быть периодической функцией при сдвигах: $U(\vec{r} + \vec{a}) = U(\vec{r})$; $\vec{a} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3, n_1, n_2, n_3 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ Периодичность потенциала относительно указанных сдвигов приводит к важному утверждению (теорема Блоха): $\psi(\vec{r}) = e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r})} U_{\vec{k}}(\vec{r})$, где $U_{\vec{k}}(\vec{r})$ – периодичная функция относительно сдвигов \vec{a}. Подстановка указанной ф-ции в УШ приводит к ур-ню: $-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 U_{\vec{k}} - i \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} \nabla U_{\vec{k}}) + 2 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} U_{\vec{k}} = E_{\vec{k}} + U_{\vec{k}}$ на собств знач некоторого оператора. При заданном \vec{k} мы получаем некоторый набор собств знач. При непрерывном изменении \vec{k} эти собств знач размаиваются в некоторые полосы. Эти полосы могут как пересекаться либо находиться на расстоянии друг от друга. Возникшие полосы образуют возможные знач энергии электронов. Промежутки между разрешенными зонами дают знач энергии, которые электрон не может иметь, промежутки – запрещенная зона. Если кристалл состоит из конечного числа атомов, то каждая разрешенная зона превращается в n близкорасположенных друг от друга уровней.</p>