

ГЛАВА I. ОСНОВНЫЕ ПРИНЦИПЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

1.1 Теория Бора

Для создания количественной теории атома водорода Н. Бор предположил, что справедливо следующее утверждение: *момент импульса электрона на разрешенной орбите квантуется*

$$mvr = n\hbar, \quad n=1,2,3,\dots \quad (1)$$

Используя второй закон Ньютона, имеем

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} = \frac{mv^2}{r}, \quad (2)$$

решая совместно (1) и (2), можно найти линейную скорость электрона на n -ой стационарной орбите и радиус боровской орбиты:

$$v_n = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar n}, \quad r_n = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2 n^2}{me^2},$$

что позволяет определить полную энергию атома водорода

$$E_n = T + V = \frac{mv^2}{2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{me^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2 n^2}.$$

Подставляя значения:

$m_e = 9.11 \cdot 10^{-31}$ кг, $e = 1.6 \cdot 10^{-19}$ Кл, $\epsilon_0 = 8.85 \cdot 10^{-12}$ Ф·м⁻¹, $\hbar = 1.05 \cdot 10^{-34}$ Дж·с и с учетом того, что 1 эВ = $1.6 \cdot 10^{-19}$ Дж, получим

$$E_n = -\frac{13.6}{n^2} \text{ эВ}. \quad (3)$$

Гипотеза Бора позволила объяснить ранее полученную Ридбергом эмпирическую формулу для спектра атомарного водорода

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right). \quad (4)$$

Идея о квантовании физических характеристик микрообъектов позволила дать качественное объяснение линейчатой структуре спектров атомов и молекул, объяснить результаты опытов Франка-Герца и Штерна-Герлаха.

Пример.

Определить длину волны излучения, возникающего при захвате протоном электрона, ускоренного разностью потенциалов 5 В.

Решение:

Найдем энергию электрона до захвата

$$E_1 = eU = 1.6 \cdot 10^{-19} \cdot 5 = 8 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}.$$

Если после захвата электрона атом водорода пребывает в основном состоянии ($n=1$), то

$$E_2 = -13.6 \text{ эВ} = -21.76 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}.$$

При переходе электрона из состояния с E_1 в состояние с E_2 испускается фотон с энергией

$$\Delta E = h\nu = E_1 - E_2 = hc/\lambda,$$

откуда

$$\lambda = hc/(E_1 - E_2) = 6.62 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^8 / (29.76 \cdot 10^{-19}) = 6.67 \cdot 10^{-8} \text{ м.}$$

Пример.

Покажите, что энергетические уровни боровского атома водорода могут быть описаны выражением $E = -2\pi\hbar R c/n^2$, где R - постоянная Ридберга.

Решение:

При переходе атома водорода из состояния E_1 в состояние E_2 испускается квант электромагнитного излучения:

$$h\nu = hc/\lambda = E_2 - E_1 = \frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right),$$

откуда

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{me^4}{64\pi^3\epsilon_0^2\hbar^3c} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right).$$

Сопоставляя полученное выражение с формулой Ридберга, имеем

$$R = \frac{me^4}{64\pi^3\epsilon_0^2\hbar^3c}, \quad \frac{E}{R} = -\frac{2\pi\hbar c}{n^2}.$$

1.2 Гипотеза де Бройля

Формальный подход и использование формул Планка и Эйнштейна

$$E = h\nu, \quad E = mc^2$$

с использованием понятия импульса фотона $p = mc$ позволяет получить соотношение

$$\lambda = h/p. \quad (5)$$

Де Бройль предложил обобщить соотношение (5) на любые материальные объекты, высказав гипотезу: *движущийся материальный объект обладает волновыми свойствами*. Многочисленные эксперименты подтвердили справедливость гипотезы де Бройля.

Пример.

Ядра гелия ускоряются разностью потенциалов 10 МВ. Определить длину волны де Бройля излучения, связанного с движением ядер.

Решение:

Энергия, которую получают ядра гелия ($Z=+2$) при прохождении разности потенциалов 10^6 В

$$E = qU = 2 \cdot 1.6 \cdot 10^{-19} \cdot 10^6 = 3.2 \cdot 10^{-13} \text{ Дж,}$$

импульс p определим из соотношения

$$E = p^2/(2m),$$

что после подстановки в (5) дает

$$\lambda = h / \sqrt{2mE},$$

масса ядра гелия $m = 4 \cdot 10^{-3} / N_A = 0.66 \cdot 10^{-26}$ кг.

Окончательно получим

$$\lambda = 6.626 \cdot 10^{-34} / (2 \cdot 0.66 \cdot 10^{-26} \cdot 3.2 \cdot 10^{-13})^{1/2} = 1.00 \cdot 10^{-14} \text{ м.}$$

1.3 Принцип неопределенности Гейзенберга

Рассмотрим результат эксперимента по прохождению частицы, имеющей импульс p_x , через отверстие Δx (рис.1).

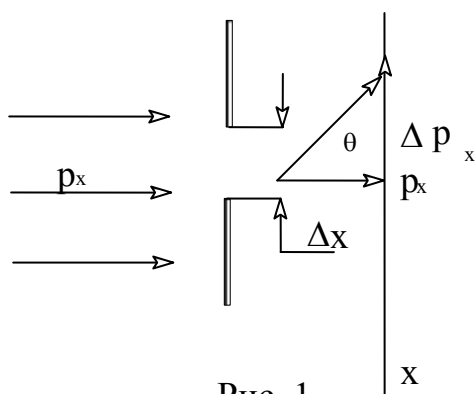


Рис. 1

При прохождении частицы через щель происходит дифракция Фраунгофера. Подставляя в классическое уравнение для дифракции

$$\sin \theta = \lambda / \Delta x$$

длину волны де Бройля (5) и решая полученное уравнение с соотношением, очевидным из геометрических соображений (рис. 1)

$$\tan \theta = \Delta p_x / p_x,$$

получим соотношение неопределенности Гейзенберга в виде

$$\Delta p_x \cdot \Delta x \approx h. \quad (6)$$

Используя постулат Планка

$$E = h\nu = hn / \Delta t, \text{ n-число колебаний, } \Delta t\text{-время,}$$

и полагая что при отсчете колебаний волны можно всегда ошибиться на одно колебание ($n=1$), получим соотношение неопределенности в виде

$$\Delta E \cdot \Delta t \approx h. \quad (7)$$

Соотношения неопределенности (6) и (7) показывают, что *микрообъект не может одновременно иметь и определенную координату и определенную проекцию импульса, или и определенную энергию и время жизни в состоянии с такой энергией*, соответственно.

Из соотношения неопределенности следует, что *не все* физические величины, характеризующие состояние микрообъекта, могут быть измерены одновременно. Физические величины, которые могут быть измерены одновременно, объединяются в т.н. *полные наборы*. В качестве примера укажем полные наборы для характеристики состояний электрона:

- 1) x, y, z, S_z
- 2) p_x, p_y, p_z, S_z
- 3) E, M^2, M_z, S_z ,

где набор 2 характеризует свободно движущийся электрон, набор 3-состояние электрона в атоме.

Соотношение неопределенности позволило объяснить противоречия квантовых переходов, уточнить понятие траектории для микрообъектов, обсудить возможность туннельного эффекта, а также оценить основные состояния различных систем.

Пример.

Электрон ускоряется разностью потенциалов 1.00 ± 0.01 кВ. Какова неопределенность положения электрона вдоль пути его движения ?

Решение:

Неопределенность импульса может быть рассчитана как

$$\Delta p_x = m_e \cdot \Delta v_x,$$

а неопределенность скорости – из интервала разности потенциалов с использованием соотношения

$$1/2 m_e v_x^2 = eU.$$

Таким образом, при $U = 0.99$ кВ:

$$v_x = \sqrt{2eU / m_e} = [2(1.6 \cdot 10^{-19} \text{ Кл}) \cdot 990 \text{ В} / (9.1 \cdot 10^{-31} \text{ кг})]^{1/2} = 1.866 \cdot 10^7 \text{ м/с}.$$

При $U = 1.01$ кВ $v_x = 1.885 \cdot 10^7$ м/с.

Неопределенность скорости:

$$\Delta v_x = (1.885 - 1.866) \cdot 10^7 = 1.9 \cdot 10^5 \text{ м/с}.$$

Неопределенность импульса:

$$\Delta p_x = (9.1 \cdot 10^{-31} \text{ кг}) \cdot (1.9 \cdot 10^5 \text{ м/с}) = 1.731 \cdot 10^{-25} \text{ кг} \cdot \text{м/с}.$$

Неопределенность положения электрона:

$$\Delta x \approx h / \Delta p_x = 6.626 \cdot 10^{-34} / (1.731 \cdot 10^{-25}) = 3.828 \cdot 10^{-9} \text{ м}.$$

Пример.

Оценить энергию основного состояния гармонического осциллятора, используя соотношение неопределенности и принцип минимума энергии.

Решение:

Энергия классического одномерного гармонического осциллятора

$$E = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}.$$

Рассматривая p_x и x как соответствующие неопределенности:

$$E(p_x) = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{mh^2\omega^2}{2p_x^2}.$$

Приравнивая производную $dE(p_x)/dp_x$ к нулю, находим величину $p_0 = \sqrt{mh\omega}$, при которой функция $E(p_x)$ принимает минимальное значение

$$E_0 = E(p_0) = h\omega.$$

Пример.

Поток частиц падает нормально на диафрагму с двумя узкими щелями, образуя на экране дифракционную картину (рис. 2). Показать, что попытка определить, через какую щель прошла та или иная частица (например, с помощью введения индикатора I), приводит к разрушению дифракционной картины. Для простоты считать углы дифракции малыми.

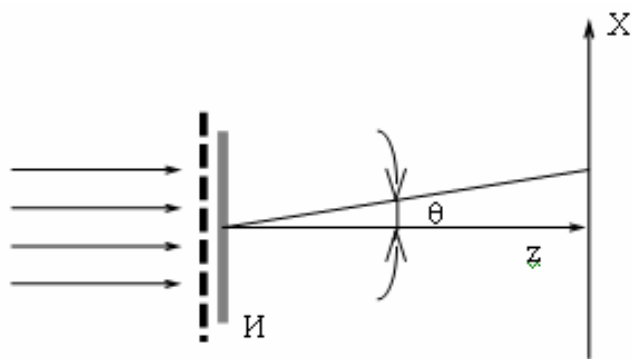


Рис. 2.

Решение:

Чтобы установить, через какую щель прошла частица, ее X -координата должна быть определена (индикатором I) с погрешностью $\Delta x < d/2$, где d - расстояние между щелями. Это значит, что в соот-

ветствии с принципом неопределенности измерение вносит неопределенность в p_x - проекцию импульса

$$\Delta p_x \geq 2h/d.$$

Условие того, что дифракционная картина не разрушится:

$$\Delta p'_x \ll p\Theta, \text{ где } \Delta p'_x \approx h/p,$$

где λ - длина дебройлевской волны частицы, $\Theta = \lambda/d$.

Таким образом, $\Delta p'_x \ll h/p$, а вносимая индикатором неопределенность, при которой дифракционная картина сохранилась бы

$$\Delta p_x \gg \Delta p'_x.$$

Пример.

Монохроматический параллельный пучок электронов нормально падает на диафрагму с энергией $E=100$ эВ, в которой узкая щель (рис. 3). На расстоянии $L=100$ см от диафрагмы расположен экран. Оцените ширину щели, при которой ширина изображения на экране будет минимальной.

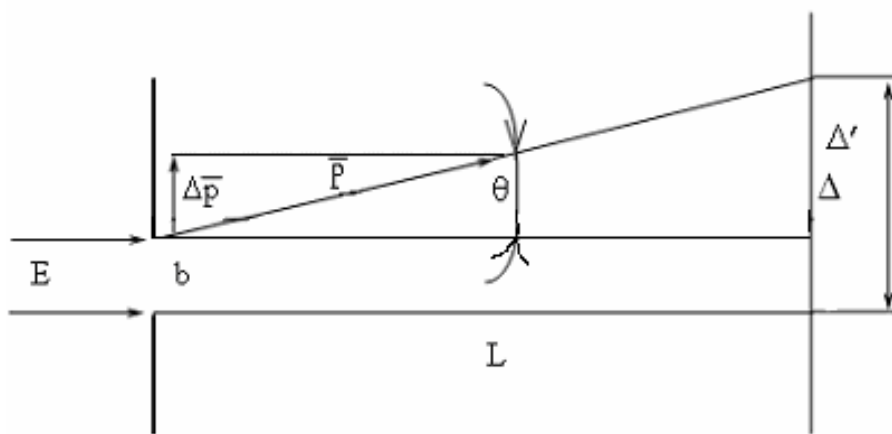


Рис. 3

Решение.

Пусть b - ширина щели, Δ' - уширение, связанное с неопределенностью импульса Δp_y , вызванного дифракцией прохождения через щель. Положив

$$\Delta y \approx b, \\ p = \sqrt{2mE}; \Delta p \approx h/b,$$

$$\Delta' = L\theta = L \cdot \frac{\Delta p}{p} = \frac{hL}{pb},$$

$$\Delta = \Delta' + b = b + \frac{Lh}{b\sqrt{2mE}} \approx 2b = 8.8 \text{ мкм},$$

$$\frac{\partial \Delta}{\partial b} = 0 = 1 - \frac{Lh}{b^2 \sqrt{2mE}}; b = \sqrt{\frac{hL}{\sqrt{2mE}}} \approx 4.4 \text{ нм}.$$

Пример.

Сравнить скорость электрона на первой боровской орбите с неопределенностью скорости электрона в атоме водорода, полагая размер атома порядка 0.1 нм.

Решение:

Неопределенность в координате электрона

$$\Delta x \leq l = 0.1 \text{ нм, тогда } \Delta v_x \geq h/ml \approx 10^6 \text{ м/с.}$$

Скорость электрона найдем из условия Бора – в первой орбите электрона должна укладываться одна длина волны

$$\lambda = 2\pi r = h/mv, v = h/mr \approx 10^6 \text{ м/с, т. е.}$$

$$v \approx \Delta v.$$

Пример.

Оценить минимальную кинетическую энергию электрона, локализованного в области размером $l = 0.1 \text{ нм}$.

Решение:

$$T \geq \Delta E = \frac{\Delta p^2}{2m}; \Delta x \leq l; \Delta p = h/l; \Delta E \geq \frac{h^2}{2ml^2},$$

$$\Delta E \leq T_{\min} \cong \frac{h^2}{2ml^2} = \frac{(6.626 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с})^2}{2 \cdot 9.1 \cdot 10^{-31} \text{ кг} \cdot (0.1 \cdot 10^{-9} \cdot \text{м})^2 \cdot 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ Дж/эВ}} \approx 150 \text{ эВ}.$$

Пример.

Оценить с помощью соотношения неопределенности энергию связи электрона в основном состоянии атома водорода и соответствующее расстояние электрона до ядра.

Решение.

Энергия электрона в атоме водорода

$$E = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r}.$$

Так как r - размер области локализации электрона, для оценки p имеем $p \sim h/r$.

$$E \cong \frac{h^2}{2mr^2} - \frac{e^2}{r}.$$

Найдем $\min$ этого выражения: $(\partial E / \partial r) = 0$.

$$\frac{\partial E}{\partial r} = -\frac{h^2}{mr^3} + \frac{e^2}{r^2} = 0 \rightarrow \frac{h^2}{mr} = e^2;$$

$$r_{\min} = \frac{h^2}{me^2} = a_0 = 0.529 \text{ Å} - \text{радиус первой боровской орбиты.}$$

$$E_{\text{св}} \sim -me^4/2h^2 = -13.6 \text{ эВ}.$$

Пример.

Оценить минимальную возможную энергию электронов в атоме He и соответствующее расстояние от электрона до ядра.

Решение.

Обозначим заряд ядра Ze , а размеры областей локализации электронов - r_1 и r_2 . Тогда для оценки импульсов имеем: $p_1 \sim h/r_1$; $p_2 \sim h/r_2$, так что кинетическая энергия электронов

$$\frac{h^2}{2m} \left(\frac{1}{r_1^2} + \frac{1}{r_2^2} \right).$$

[Примечание:

$$\frac{e^2}{|\bar{r}_1 - \bar{r}_2|} \approx \frac{e^2}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2}} \approx \frac{e^2}{r_1 + r_2}]$$

Для энергии взаимодействия между электронами примем величину порядка $e^2/(r_1 + r_2)$.

$$E(r_1; r_2) = \frac{h^2}{2m} \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) - Ze^2 \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) + \frac{e^2}{r_1 + r_2}.$$

Считая $r_1 = r_2$ и используя $(\partial E / \partial r_1) = 0$, находим:

$$r_{\min} = \frac{h^2}{me^2} \cdot \frac{1}{Z - 1/4}; E_{\min} = -2 \left(Z - \frac{1}{4} \right) \frac{me^4}{2h^2} = -2(Z - 1/4) 13.6 \text{ эВ}.$$

Пример.

Атом испустил фотон с длиной волны $\lambda = 600 \text{ нм}$ за время $\tau = 10^{-8} \text{ с}$. Оценить неопределенность Δx , с которой можно установить координату фотона в направлении его движения, а также относительную неопределенность его длины волны.

Решение.

$$\Delta x \sim c\tau = 3 \text{ м}; (\Delta\lambda/\lambda) = c\tau/\lambda; \Delta E \Delta t = \hbar c\tau/\Delta\lambda \geq \hbar; \Delta\lambda \leq c\tau.$$

1.4 Принцип дополнительности Бора

Идея корпускулярно-волнового дуализма и принцип неопределенности позволил Бору выдвинуть принцип дополнительности. Принцип утверждает, что в любом опыте с микрообъектами наблюдатель получает информацию не о свойствах объектов самих по себе, а о свойствах объектов в конкретных условиях, в т.ч. и с учетом их взаимодействия с измерительными приборами. Информацию об объекте, полученную при некоторых определенных условиях, надо рассматривать как дополнительную к информации, полученной при других условиях.

Принцип дополнительности является логической основой квантовой механики, раскрывая роль наблюдателя и измерительного прибора в опытах с микроробъектами.

1.5 Уравнение Шредингера. Принцип соответствия

Используя гипотезу де Бройля и уравнение Максвелла для плоской волны, *построим* уравнение, описывающее движение микроробъекта. Уравнение Максвелла имеет вид:

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} = \frac{1}{v^2} \frac{d^2\phi}{dt^2}, \quad (8)$$

где ϕ -функция, описывающая волну (*волновая функция*), v -скорость распространения волны, t -время.

Общим решением (8) является функция

$$\Phi(x,t)=a \cdot \exp[2\pi i(x/\lambda-vt)]=\Psi(x) \cdot \exp(-2\pi i vt), \quad (9)$$

где a -амплитуда, ν - частота, λ - длина волны, $\Psi(x)$ - функция, зависящая от координаты.

Двукратное дифференцирование (9) по x и по t дает:

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} = \frac{d^2\Psi}{dx^2} \cdot \exp(-2\pi i vt), \quad \frac{d^2\phi}{dt^2} = -4\pi^2 \nu^2 \exp(-2\pi i vt) \cdot \Psi(x). \quad (10)$$

Подставляя (10) в (8) и используя соотношения

$$v=\nu \cdot \lambda, \quad h=h/(2\pi),$$

а также воспользовавшись соотношением де Бройля, получим

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = -\frac{p^2}{h^2} \Psi. \quad (11)$$

Вводя в уравнение (11) множитель кинетической энергии $p^2/(2m)$ и учитывая, что энергия системы

$$E=T+V,$$

имеем:

$$\left(-\frac{h^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V\right) \Psi = E \cdot \Psi.$$

Величина

$$\left(-\frac{h^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V\right) - \text{называется оператором Гамильтона } \hat{H},$$

тогда

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \quad (12)$$

стационарное уравнение Шредингера.

Для систем, состояние которых изменяется со временем, используется временное уравнение Шредингера.

Дифференцируя (9) по времени и используя постулат Планка

$$E = 2\pi \nu h,$$

получим

$$\frac{d\phi(x,t)}{dt} = -\frac{iE}{h} \phi(x,t). \quad (13)$$

С учетом соотношений (9) и (12) уравнение (13) можно записать в виде

$$i\hbar \frac{d\Phi}{dt} = \hat{H}\Phi \quad (14)$$

полное уравнение Шредингера.

Дифференцируя (9) по координате и используя соотношение де Бройля, сокращая части, зависящие от времени, получим:

$$\frac{d\Psi}{dx} = \frac{ip}{\hbar} \Psi. \quad (15)$$

Приводя (15) к виду, аналогичному (12), получим

$$\hat{p}_x \Psi = p_x \Psi,$$

где

$$\hat{p}_x = -i\hbar d/dx \quad (16)$$

оператор импульса.

Предполагая, что классическому выражению для кинетической энергии можно противопоставить некоторый квантовомеханический оператор, и с учетом (16), получим

$$T = \frac{p_x^2}{2m} \ggggggg \hat{T} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \quad (17)$$

Обобщая на трехмерный случай, выражения для $\hat{H}, \hat{p}, \hat{T}$ можно записать

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x, y, z), \quad \hat{p} = -i\hbar \nabla, \quad \hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2, \text{ где}$$

$$\nabla^2 = \frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} + \frac{d^2}{dz^2} - \text{оператор Лапласа},$$

$$\nabla = \frac{d}{dx} + \frac{d}{dy} + \frac{d}{dz}.$$

Очевидно, что

$$\hat{H} = \hat{T} + V(x, y, z).$$

Таким образом, можно сделать вывод: *при описании поведения микрообъектов любой наблюдаемой физической величине можно поставить в соответствие некоторый квантовомеханический оператор* – принцип соответствия Бора.

При этом поведение микрообъекта будет описываться волновой функцией, зависящей от координат и удовлетворяющей операторному уравнению

$$\hat{F}\Psi = F\Psi, \quad (18)$$

где Ψ - собственная функция оператора $\hat{F}$,

F - среднее значение физической величины в состоянии, описываемом Ψ (собственное значение оператора физической величины).

Так как для каждого собственного значения F_n существует своя функция Ψ_n , то в общем виде операторное уравнение

$$\hat{F}\Psi_n = F\Psi_n. \quad (19)$$

1.6 Принцип суперпозиции. Волновая функция

Между состояниями микрообъекта, отвечающим разным полным наборам, существует связь: любое состояние из одного набора может быть представлено

в виде суперпозиции состояний другого набора. Принцип суперпозиции состояний может быть сформулирован следующим образом: *если какая-либо система способна находиться в состоянии, изображаемом волновой функцией Ψ_1 , и в другом состоянии, изображаемом Ψ_2 , то она может находиться и в состоянии, изображаемом Ψ такой, что*

$$\Psi = C_1 \Psi_1 + C_2 \Psi_2.$$

В общем виде линейная комбинация собственных функций имеет вид

$$\Psi = \sum C_i \Psi_i. \quad (20)$$

Выясним физический смысл волновой функции.

Для среднего значения физической величины $\bar{F}$ операторное уравнение имеет вид

$$\hat{F}\Psi = \bar{F}\Psi. \quad (21)$$

Умножим (21) слева на комплексно-сопряженную функцию Ψ^* , проинтегрируем по всему пространству изменения Ψ и, используя (20) и (18), получим

$$\sum C_i^* \sum C_j F_j S_{ij} = \bar{F} \sum C_j S_{ij}, \quad (22)$$

где

$$S_{ij} = \int \Psi_i^* \Psi_j dq = \begin{cases} 1, & i=j \\ 0, & i \neq j \end{cases}.$$

Тогда (22) примет вид

$$\sum C_i^* C_i F_i = \bar{F} \sum C_i^* C_i. \quad (23)$$

Сопоставляя (23) с естественным определением среднего

$$\bar{F} = \sum F_i p_i,$$

где p_i -вероятность появления собственных значений F_i , причем

$$\sum p_i = 1,$$

можно сделать вывод:

$$C_i^* C_i = |C_i|^2$$

есть вероятность обнаружения микрообъекта в i -состоянии.

Таким образом, физический смысл волновой функции носит вероятностный характер: *квадрат модуля волновой функции есть плотность вероятности обнаружить микрообъект в данной точке пространства.*

$$d\omega / dq = \Psi^* \Psi = |\Psi|^2, \quad (24)$$

где ω -вероятность обнаружения микрообъекта, равная

$$\omega = \int |\Psi|^2 dq. \quad (25)$$

Если интегрирование (25) ведется по всей области существования частицы, то интеграл равен 1- достоверное событие, с другой стороны, очевидно, что нахождение микрообъекта в двух состояниях одновременно – i и j – недостоверное событие, интеграл (25) равен 0.

Кратко это записывается в виде условия ортонормировки волновой функции

$$\int \Psi_i^* \Psi_j dq = \delta_{ij}. \quad (26)$$

Дельта-символ называется символом Кронекера-Вейерштрасса

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & i=j \\ 0, & i \neq j \end{cases}.$$

Если интеграл (26) равен 1, говорят, что волновая функция нормирована; если равен 0-волновые функции ортогональны.

Пример.

Определить значения констант, при которых полиномы

$$y_0=1, y_1=x+a_1, y_2=C_2x^2+b_2x+a_2,$$

ортогональны в интервале $(-1,1)$. Получить нормированные в этом интервале функции.

Решение:

$$\int_{-1}^1 y_0 y_1 dx = \int_{-1}^1 (x + a_1) dx = (x^2 / 2 + a_1 x) \Big|_{-1}^1 = 2a_1, a_1 = 0;$$

$$\int_{-1}^1 y_0 y_2 dx = \int_{-1}^1 (C_2 x^2 + b_2 x + a_2) dx = 2/3 C_2 + 2a_2,$$

$$2/3 C_2 + 2a_2 = 0, -1/3 C_2 = a_2;$$

$$\int_{-1}^1 y_1 y_2 dx = \int_{-1}^1 (x + a_1)(C_2 x^2 + b_2 x + a_2) dx = (C_2 x^4 / 4 + x^3 b_2 / 3 - C_2 x^2 / 6) \Big|_{-1}^1 = 0,$$

$$b_2 = 0;$$

$$y_0 = 1, y_1 = x, y_2 = C_2(x^2 - 1/3); \Psi_0 = C_0 y_0, \Psi_1 = C_1 x, \Psi_2 = C_2(x^2 - 1/3)$$

$$\int_{-1}^1 \Psi_0^2 dx = 1 = C_0^2 \int_{-1}^1 dx, \quad C_1^2 \int_{-1}^1 x^2 dx = 1, \quad C_2^2 \int_{-1}^1 (x^4 - 2/3 x^2 + 1/9) dx = 1,$$

$$C_0 = 2^{-1/2}, C_1 = (3/2)^{1/2}, C_2 = (45/8)^{1/2}.$$

Отметим, что из всех выше изложенных принципов квантовой механики только уравнение Шредингера и принцип суперпозиции дают возможность для количественного описания поведения микрообъектов. Остальные принципы позволяют давать качественное объяснение свойствам микрообъектов в рамках понятий макромира.

Задачи и вопросы

1. Найдите значение постоянной Ридберга для однократно ионизированного атома гелия.
2. Дайте обобщение формулы (3) для одноэлектронной системы с зарядом ядра Z .

3. Используя формулу де Бройля и аналогию движения электрона по круговой боровской орбите с механическими стоячими волнами, вывести условие квантования момента импульса теории Бора.
4. Атомарный водород после облучения светом с длиной волны λ начинает испускать всего три линии. Найти λ .
5. Квант света с энергией 15 эВ вырывает электрон из атома водорода, находящегося в основном состоянии. Найти скорость движения вырванного электрона.
6. Используя соотношение де Бройля, найти радиус первой боровской орбиты атома водорода из условия минимума полной энергии.
7. Определить радиус орбиты и скорость электрона в основном состоянии в двукратно ионизированном атоме лития.
8. Определить количество оборотов, совершаемых электроном за 1с в состоянии с $n=3$ в атоме водорода.
9. Определить изменение скорости атома водорода при переходе электрона из состояния с $n=4$ в основное состояние.
10. Определить частоту излучения, возникающего при захвате электрона, ускоренного разностью потенциалов 10 В, ядром гелия.
11. Найти потенциал ионизации атома водорода.
12. Найти наименьшую и наибольшую длины волн спектральных линий атома водорода в видимой области спектра.
13. Найти наименьшую энергию, какую должны иметь электроны, чтобы при возбуждении атома водорода ударами этих электронов проявились все линии всех серий спектра водорода. Какую минимальную скорость должны иметь эти электроны?
14. Пусть для описания движения электрона в атоме водорода используется планетарная модель. Радиус круговой орбиты равен 0.3 А. Рассчитать:
 - а) угловую частоту электрона; б) его линейную скорость;
 - в) его кинетическую энергию; г) потенциальную энергию атома;
 - д) полную энергию.
15. Найти отношение гравитационной силы притяжения, действующей между электроном и протоном, к кулоновской силе. Покажите, что при рассмотрении атома водорода гравитационной силой можно пренебречь.
16. Отношение $\alpha = v_1/c$, где v_1 – линейная скорость электрона при $n=1$ в боровской модели атома водорода, называется постоянной тонкой структуры. Покажите, что:
 - а) $\alpha = e^2 / 4\pi\epsilon_0\hbar c$; б) $\alpha = 1/137$;
 - в) энергетические уровни атома водорода могут быть описаны $E_n = -\alpha^2 mc^2 / 2n^2$.
17. а) С помощью диаграммы энергетических уровней объясните понятие энергии возбуждения $E_{\text{возб.}}$, энергии связи $E_{\text{св.}}$, энергии ионизации $E_{\text{ион.}}$ для данного состояния;
 - б) для любого данного n покажите, что $E_{\text{возб.}} = E_{\text{ион.}} + E_{\text{св.}}$;
 - в) определите энергию возбуждения при $n=4$ в атоме водорода;
 - г) найти энергию связи для электрона при $n=4$ и путем подстановки значений величин проверить соотношение в пункте б).

18. Найти для атома легкого и тяжелого водорода разность:
- а) энергий связи электронов в основных состояниях;
 - б) первых потенциалов возбуждения;
 - в) длин волн резонансных линий.
19. Вычислить для мезоатома водорода (вместо электрона движется мезон, имеющий тот же заряд, но массу в 207 раз большую):
- а) расстояние между мезоном и ядром в основном состоянии;
 - б) длину резонансной линии;
 - в) энергии связи основных состояний мезоатомов водорода, ядра которых протон и дейтрон.
20. Найти для позитрония (система из электрона и позитрона, вращающаяся вокруг ее центра масс):
- а) расстояние между частицами в основном состоянии;
 - б) потенциал ионизации и первый потенциал возбуждения;
 - в) постоянную Ридберга и длину волны резонансной линии.
21. Определите длины волн первых двух линий в спектре He^+ , если эти линии соответствуют первым двум линиям в серии Бальмера.
22. Определить длину волны человека, масса которого 60 кг и скорость 5 км/ч. Какую частоту должен был бы иметь γ -луч, если бы его длина волны была так мала? Выразить энергию луча в эВ.
23. Выразить дебройлевскую длину волны электрона и протона, кинетическая энергия которых 1.00 кэВ. При каких значениях кинетической энергии их длина волны равна 100 пм?
24. При увеличении энергии электрона на 200 эВ его дебройлевская длина волны изменилась в 2 раза. Найти первоначальную длину волны.
25. Найти длину волны молекул водорода, движущихся с наиболее вероятной скоростью в газе при $t=0^\circ\text{C}$.
26. Какова длина волны де Бройля для:
- а) массы 1 г, перемещающейся со скоростью 1 м/с;
 - б) массы 1 г, перемещающейся со скоростью 100 км/с;
 - в) атома He при комнатной температуре;
 - г) электрона, ускоренного разностью потенциалов 100 В, 1 кВ, 100 кВ.
27. Определить длину волны молекул азота при 300 К.
28. Определить температуру, при которой молекулы кислорода имеют длину волны 1000 А.
29. Рассчитать угол, на который отклоняется электрон, пролетая через отверстие диаметром 10^{-4} мм, если его скорость 10 м/с.
30. Определить разность потенциалов, необходимую для того, чтобы первоначально покоящийся протон дифрагировал на кристалле с постоянной решетки 2 А.
31. Убедиться, что измерение координаты x частицы с помощью микроскопа вносит неопределенность в ее импульс Δp_x такую, что $\Delta x \Delta p_x \cong h$. Иметь в виду, что разрешение микроскопа $d = \lambda / \sin \theta$, λ - длина волны используемого света (рис. 4).

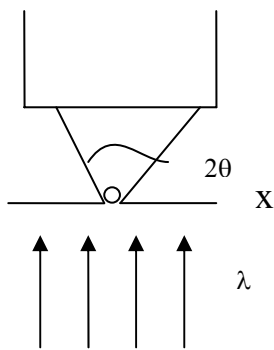


Рис.4

32. Электрон с кинетической энергией 10 эВ локализован в области размером 1 мкм. Оценить неопределенность скорости электрона.

33. Оценить наименьшие погрешности, с которыми можно определить скорость электрона и протона, локализованных в области размером 1 мкм.

34. В некоторый момент область локализации свободного электрона 0.1 нм. Оценить ширину области локализации этого электрона через промежуток времени 1.0 с.

35. Прямолинейная траектория частицы в камере Вильсона представляет собой цепочку малых капель тумана, размер которых $d \approx 1$ мкм. Можно ли, наблюдая след электрона с кинетической энергией 1 эВ, обнаружить отклонение в его движении от классических законов?

36. Принцип неопределенности ограничивает наши возможности в определении одновременно импульса и положения частицы. Но почему тогда классические физики не подозревают о таких ограничениях? Рассчитать минимальную неопределенность скорости мяча массой 500 г, о котором известно, что он находится в пределах 10^{-6} м от биты. Какова минимальная неопределенность положения пули массой 5 г, о которой известно, что она имеет скорость между 350.00001 и 350.00000 м/с?

37. Какая возникает неопределенность в энергии частицы массой m при ее локализации в области размером 1 см?

38. Не противоречит ли принципу неопределенности состояние с нулевым моментом количества движения?

39. Проверить принцип неопределенности на примере основного состояния электрона в одномерной прямоугольной яме с бесконечными стенками.

40. Частица массой m движется в одномерной прямоугольной яме шириной l с бесконечно высокими стенками. Неопределенность в знании координаты частицы $\Delta x = l$, импульс же частиц известен точно из ее полной энергии. Не противоречит ли это неравенству Гейзенберга?

41. Оценить минимальную энергию $E_{\min}$ гармонического осциллятора, имеющего массу m (потенциал $U = kx^2/2$, частота $\omega = (k/m)^{1/2}$), используя соотношение неопределенности.

42. Используя принцип неопределенности, оценить энергию основного состояния атома водорода.

43. Используя принцип неопределенности, рассчитать энергию ионизации и полную энергию для атома He.

44. Оценить величину кулоновского отталкивания электронов в атоме He.

45. Пользуясь принципом неопределенности, оценить энергию основного состояния иона Li^+ .

46. Используя принцип неопределенности, определить энергию H_2^+ , энергию связи и межъядерное расстояние.

47. Используя принцип неопределенности, оценить величину "размытия" края полосы оптического поглощения в эффекте Франца-Келдыша. [Указание: воспользоваться выражением для энергии заряженной частицы в электрическом поле].
48. С какой точностью могут быть определены мгновенные положения космической ракеты массой 40 т, летящей со скоростью 8 км/с, и молекулы бензола при комнатной температуре?
49. Используя принцип неопределенности, оценить энергию основного состояния частицы массой m , если потенциальная энергия $U(x)=ax$.
50. Найти нормированную функцию:
- а) $y = \sin(\pi nx/a)$ в интервале $(0,a)$, a -константа, $n=1,2,3,\dots$;
- б) $\psi = \sin(\pi n_1 x/a) \sin(\pi n_2 y/b) \sin(\pi n_3 z/c)$, a, b, c -константы, $n_i=1,2,3,\dots$, в интервалах $x \in (0,a), y \in (0, b), z \in (0,c)$; в) $y=a(x^2+x-4)$ в интервале $(-1,5)$;
- г) $y = \sin x$ в интервале $(0, \pi)$; д) $y = \cos x$ в интервале $(0, \pi)$.
51. Проверить ортогональность функций:
- а) $y_1 = \cos^2 x, y_2 = \sin^2 x$ в интервале $(0, \pi)$;
- б) $y_1 = 1 - \cos^2 x, y_2 = \sin x$ в интервале $(0, \pi)$;
- в) $y_1 = 9 - \cos^4 x - 6 \cos^2 x + 1, y_2 = \sin x$ в интервале $(0, \pi)$;
- г) $y_1 = (1 - \cos x)^2, y_2 = \sin x$ в интервале $(0, \pi)$;
- д) $y_1 = 5x^2 - 3x + 2, y_2 = 4x^2 - 5x + 1$ в интервале $(-5,10)$.
52. Какие эксперименты указывают на невозможность классического описания движения микрочастицы?
53. Что такое волновая функция? От чего она зависит?
54. Почему волновые свойства частиц обнаружены в явлениях атомного масштаба? Можно ли в рамках квантовой теории описывать движения макротел? Вселенной?
55. Что означают координаты x, y, z в волновой функции $\psi(x, y, z)$. Чем эти координаты отличаются от координат частицы в макром мире?
56. Как в квантовой механике понимается классическое выражение "Частица движется"?
57. Волновая функция позволяет получить полную информацию о квантовой системе. Что это значит?
58. Может ли квантовая частица покоиться? Почему?
59. Обязательно ли использование ψ -функции в аппарате квантовой механики? Всегда ли ψ -функции имеют математический вид волн? Приведите примеры, подтверждающие Ваши утверждения.
60. Каким условиям должна удовлетворять волновая функция частицы? Какой физический смысл имеют стандартные условия: непрерывности, однозначности, ортогональности, нормированности ψ ?
61. Какой физический смысл можно увидеть в том, что ψ -функция свободной частицы не нормируется обычным образом? Какой физический смысл в нормировке волн де Бройля?
62. Сформулируйте принцип суперпозиции полей, волн.

63. Пусть r - расстояние до некоторой фиксированной точки, которое может принимать значения от 0 до ∞ . Волновая функция частицы имеет вид $Ae^{i\alpha r}$. Любые ли значения r допустимы?
64. Может ли функция e^r быть волновой функцией? А функция e^{ir} ? Почему? Может ли функция $\arcsin x$ быть волновой функцией?
65. Пусть α - угол, определяющий положение точки на окружности. Нужны ли какие-либо ограничения на функцию $\psi = e^{i\alpha m}$, чтобы она могла быть волновой функцией? $m = \pm 1, \pm 2, \dots$
66. Какое выражение характеризует плотность вероятности найти частицу с координатами x, y, z ?
67. Чем отличается плотность вероятности от вероятности? Какова вероятность найти частицу в точке x_0, y_0, z_0 ? А плотность вероятности?
68. Проходя через отверстие, электроны попадают на один из трех участков экрана: A, B , или C . На участок B они попадают чаще, чем на участки A или C . Вы собираетесь пропустить через отверстие очередной электрон. Ответьте на вопросы:
- Можно ли предсказать, куда попадет электрон?
 - В какой из участков - A, B или C вероятность попадания наибольшая?
69. Для чего введен принцип суперпозиции состояний в квантовой механике?
70. Какой математический смысл имеет утверждение, что умножение волновой функции на любую постоянную C не меняет состояние системы?
71. Будет ли суперпозиция двух разных волн де Бройля описывать состояние с определенным импульсом и энергией?

ГЛАВА II. МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АППАРАТ КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ

2.1 Операторы квантовой механики

Одной из первых задач квантовой теории было объяснение того экспериментального факта, что наблюдаемые разности энергии атомов принимают дискретное множество значений. Математический аппарат, позволяющий получить дискретные величины как функции параметров (заряд, масса микрочастицы), основан на использовании теории линейных операторов.

Оператором называют математический символ, который, действуя на некоторую функцию, дает новую функцию

$$\hat{A}\Psi(x) = \Phi(x). \quad (1)$$

Примером оператора $\hat{A}$ и функций $\Phi(x)$ и $\Psi(x)$ являются, например,

$$\hat{A} = d/dx, \Psi(x) = x^2, \Phi(x) = 2x \text{ или } \hat{A} = \sqrt{}, \Psi(x) = x^{12}, \Phi(x) = x^6.$$

Операторы, используемые в квантовой механике, должны быть линейными, то есть удовлетворять равенству

$$\hat{F} \sum C_i \Psi_i = \sum C_i \hat{F} \Psi_i. \quad (2)$$