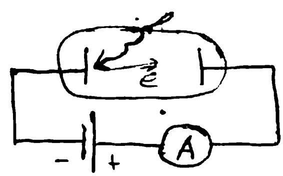
① Корпускулярные свойства электромагн-го излучения. Фотоэлектрический эффект. Тормозное излучение. Эффект Комптона

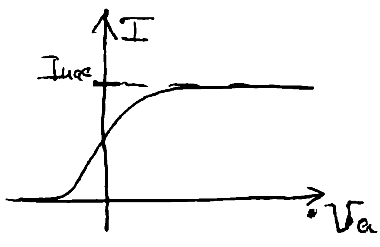
1887г - Герц обнаружил явление внешнего фотоэффекта, но не стал им заниматься. Позднее фотоэффект исследовал Столетов.

Фотоэффект - явление возникновения свободных электронов под действием внешнего излучения.

Установка для изучения:



ВАХ процесса (эксп)



Экспериментальные сведения о фотоэффекте:

1) $I_{нас} = f(\Phi)$ Φ-св. пот.

2) Фотоэффект протекает безынерционно, т.е фототок появл-ся мгновенно - одновременно с освещением.

3) $\exists \nu_{гр}: \nu < \nu_{гр}$ - нет фототока

4) $E^{\bar{e}}_{кин} = f(\nu)$; $E^{\bar{e}}_{кин} \neq f(\Phi)$ - кин. энергия вылетевших электронов не зависит от

потока, зависит только от частоты...
Классическое объяснение фотоэффекта – раскачивание электронов эл-м волной – не объясняет последние 3 св-ва
Объяснение – работа Эйнштейна по фотоэф:
Фотоэффект – поглощение металлом квантов света $h\nu$ с совершением работы выхода A и выходом электрона с кин. энерг. E
$$h\nu = A + \frac{mv^2}{2} = A + E^e_{кин}$$
– объясняет все св-ва фотоэффекта

Для объяснения фотоэффекта необходимо предположить ~~дискрет~~ поглощение света квантами – порциями по $h\nu$

Объяснение св-в фотоэффекта по Эйншт.
1) Безынерционность – следствие того, что излучение электрона явл-ся следствием мгновенного неупругого поглощения кванта $h\nu$ металлом.
2) $\exists A = h\nu_0 \rightarrow E^e_к = h(\nu - \nu_0) \Rightarrow$

при $\nu < \nu_0$ электрон не выходит.

4) $E_к^e = h\nu - A_{пор.}$ - зависит только от частоты ν и свойств материала.

<u>Тормозное излучение</u>

Для рентген. изл-я $h\nu >> A$ =>

$E_к^e = h\nu$; $eU = h\nu$, U - уск. разн. пот-ла.

Тормозное излучение, или явление обратного фотоэффекта - получение рентгеновских квантов за счет ~~бомбардир~~ кин. энергии электронов, бомбардирующих металл. Такой процесс происходит в рентгеновских трубках. Формула $eU = h\nu$ определяет в таком случае частоту рентгеновских квантов.

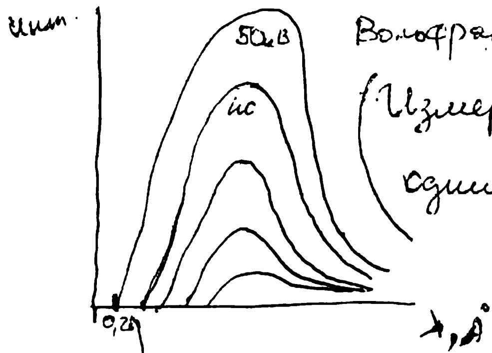
При бомбардировке антикатода электроны тормозятся, из-за чего возникает "тормозное рентгеновское излучение". Спектральная плотность интенсивность тормозного излучения зависит от материала антикатода, но в ∀ случае ∃ $\lambda_{min} = \frac{hc}{eV}$,

ниже которой изл-я вообще нет

~~Ана~~ Коротковолновая граница (λ_{min}),

а также ~~а ...~~ зависит от V,

не зав-т. от материала



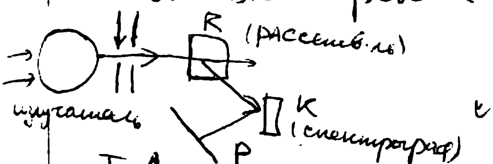
Вольфрам

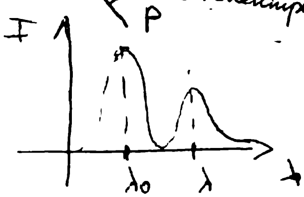
(Измерение λ_{min} явл-ся одним из способов определения h)

λ_{min} для каждого конкр-го случая.

Эффект Комптона

Комптон исследовал рассеяние рентген. волн на своб. электронах





Экспериментально получ.

$$\lambda' - \lambda_0 = 2\frac{h}{mc}\sin^2\frac{\theta}{2}$$

Соотношение интенсивности пиков зависит от соотн-я св. и связ электронов в образце.

Открытие Комптона — распространение света квантами. Квант света назвали фотоном, энергия фотона $E = h\nu$, импульс $p = \frac{E}{c} = \hbar \frac{\omega}{c} = \hbar k$, момент импульса $L = \frac{E}{\omega} = \hbar$

Объяснение эфф-та Комптона:

$\mathcal{E}_\varphi + \mathcal{E}_0 = \mathcal{E}_\varphi' + \mathcal{E}_e$, $\bar{p}_\varphi = \bar{p}_\varphi' + \bar{p}_e$

$\mathcal{E}_e = \mathcal{E}_\varphi - \mathcal{E}_\varphi' + \mathcal{E}_0$; $\bar{p}_e = \bar{p}_\varphi - \bar{p}_\varphi'$

$$\left(\frac{\mathcal{E}_e}{c}\right)^2 - p_e^2 = \frac{(\mathcal{E}_\varphi - \mathcal{E}_\varphi' + \mathcal{E}_0)^2}{c^2} - (\bar{p}_\varphi - \bar{p}_\varphi')^2$$

$$? \left(\frac{\mathcal{E}}{c}\right)^2 - p^2 = \mathrm{Inv} \overset{\text{для фот.}}{=} 0$$

$$\Rightarrow \left(\frac{\mathcal{E}_e}{c}\right)^2 - p_e^2 = \left(\frac{\mathcal{E}_0}{c}\right)^2, \quad \left(\frac{\mathcal{E}_\varphi}{c}\right)^2 = p_\varphi^2; \quad \left(\frac{\mathcal{E}_\varphi'}{c}\right)^2 = p_\varphi'^2$$

$$\Rightarrow \underbrace{\frac{\mathcal{E}_\varphi \mathcal{E}_\varphi'}{c^2}}_{|p_\varphi p_\varphi'|} + \frac{\mathcal{E}_\varphi' \mathcal{E}_0}{c^2} - \frac{\mathcal{E}_\varphi \mathcal{E}_0}{c^2} - \bar{p}_\varphi \bar{p}_\varphi' = 0$$

$$\Rightarrow 1 - \cos\theta = m_0 c \left(\frac{1}{p_\varphi'} - \frac{1}{p_\varphi}\right)$$

$$p_\varphi = h/\lambda; \quad p_\varphi' = \frac{h}{\lambda'} \Rightarrow \lambda' - \lambda = \lambda_k (1 - \cos\theta) =$$

$$= \frac{h}{m_e c} \sin^2 \frac{\theta}{2}$$

$\lambda' - \lambda$ — не зав-т от в-ва расс-го тела, а только от угла θ

λ_k — комптоновская длина волны для e

(2) Дифракция микрочастиц. Гипотеза Де-Бройля.

Гипотеза Де-Бройля.

Де-Бройль предположил, что частицы обладают волновыми свойствами. Он ввел для частиц ω и k так, чтобы $(\omega/c, k)$ образовали 4х-вектор аналогично $(E/c, p)$.

$E = \hbar\omega;$

$p = \hbar k.$

Как и E, ω будет определена с точ. до произвольной аддитивной постоянной.

Волна де Бройля на самом деле явл-ся вероятностной волной

$$\lambda_{деБр} = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{h}{p} \underset{\text{если } p = m_0 c}{=} \frac{h}{m_0 c} = \lambda_{компт.}$$

$v_{фаз} = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{p} = \frac{c^2}{v} \geq c$, но это нормально

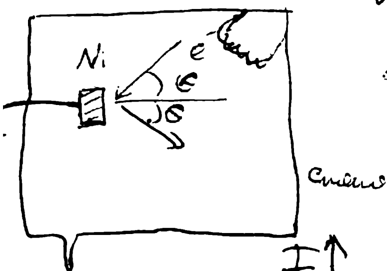
$v_{гр} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{dp} = \frac{v\,dp}{dp} = v$ - групповая скорость совпадает со ск-ю частицы

$\Rightarrow$ частица в теории Де-Бройля является волновым пакетом

Обоснование теории де-Бройля. —

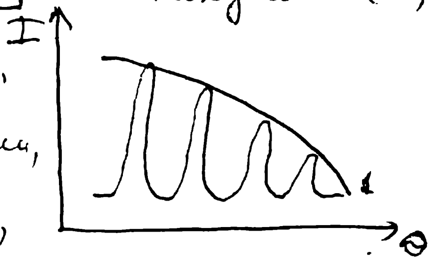
Дифракция микрочастиц.

1) „Случайный эксперимент" Дэвиссон, Джермер



Исследовали рассеяние электронов, отразившихся от пов-ти никеля

Получили (1)



Колбу разбили, образец обожгли, [redacted] запаяли, [redacted]учили (2)

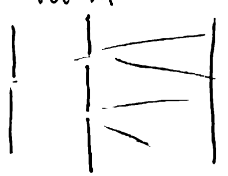
Они поняли, что наблюдают дифракцию

До обжига — был поликристаллич. никель

После — появилась кристаллическая структура

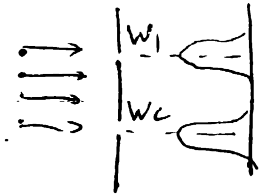
$2d\sin\theta = m\lambda$ (усл-е max дифр)

2). Опыт Юнга ...



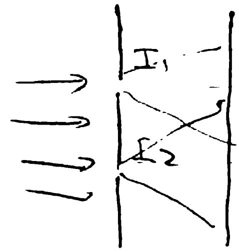
] из 2 щелей попадают

а) Обычные частицы.



Вер-ть прох-я $W_1 + W_2$

б) Волны



$I \neq I_1 + I_2$

$I \sim (A_1 + A_2)^2$

в) Электроны $I \sim (A_1 + A_2)^2$, A — амплитуда волны де-Бройля.

Малое время экспоз- ~~частиц~~ корпускулярн картина

Большое - интерфер. картина.

Если корпускулы - то скл-ся инт-ти пучков, инт ~ вер-ти встретить электрон.

Если волны - скл-ся амплитуды напр-ти поля в волне $I \sim (A_1 + A_2)^2$

У электронов получаем - вводим велич де бр, $A = \sqrt{W}$

— инт-ть на экране $\sim (A_1 + A_2)^2$

③ Соотношение неопределенностей. Корпускулярно-волновой дуализм материи

Корпускулярно-волновой дуализм.

Попробуем описать частицу с какой-либо одной точки зр.:

1) ∃ частица - волновой ~~п~~ пакет.
Но волны де-Бр даже в вак. обл. дисперсией: $\left(\frac{\hbar\omega}{c}\right)^2 - (\hbar k)^2 = (m_0 c)^2$

$V_{фаз} = f(\omega)$ => Даже если изначально волновой пакет и был локализован, то с течением времени монохром. волны разных частот, из которых он состоит, будут расходиться с разными ~~в~~ $V_{фаз}$, и он развалится => частица не может быть волновым пакетом, образованным из волн де-Бройля.

2) ∃ волновые свойства частиц явл-ся образованиями самих частиц.
Но тогда одна частица не

будет обладать волновыми св-ми –
– Это неверно, т.к картина дифр-ии
для малого кол-ва частиц за
длит. время совпадают с картинами
дифр-ии для большого кол-ва за
короткое – экспериментальный
ФАКТ. – тоже физия
=> Нужно какое-то другое объяснение.
Поэтому, чтобы, с одной стороны,
частицы оставались мат. объектами,
а с др. стороны могли проявлять
волновые св-ва, волнам Де-Бройля
приписывают смысл описания вероят-
ности нах-я частицы в том
или ином месте. → Интенсивность
волны де-Бройля в каком-либо
месте пр-во пропорциональна
вероятности обнаружения там
частицы.
Но вероятностные св-ва могут

быть установлены только в опыте со многими частицами или с одной, но во многих опытах.
В квантовой механике такие совок-ти наз-т квантовыми ансамблями, и считают, что он реализуется путем задания каких-то макроскопических параметров.
Волновые свойства присущи всем частицам по отдельности, но обнаружить их можно только рассматривая ансамбли частиц.

Соотношение неопределенностей Гейзенберга

Ясно, что такие понятия, как λ - или ω, описывают волну не в конкретной точке пространства-времени, а как характеристики длительности в пр-ве, и во времени процесса

~~Е~~ Если все же волновое образование занимает ~~конечн~~ огранич-ю область пространства, то для его описания понадобятся многие волны с различными k, гасящие друг друга всюду, за исключением этой области. Пусть длина пакета Δx, тогда для его описания потр-ся волны, волновые числа которых заним-ют интервал Δk, причем $\Delta x \cdot \Delta k \geq 2\pi$

(Наоборот - при дост. монохром. волне Δk она должна быть длинной Δx)

Выведем это соотн-е

$\forall$ синусоиды $k \in (k_0, k_0 + \Delta k)$

В x фазы мен-ся: $\varphi \in (x k_0, x(k_0 + \Delta k)$

Если $x \Delta k = 2\pi$, то все синусоиды гасят друг друга (т.к сопр-ся)

В этой точке разность фаз между кр-ми син

$(k + \Delta k)(x + \Delta x) - k(x + \Delta x) =$

$= x\Delta k + \Delta x \Delta k = 2\pi + \Delta x \Delta k$

Ближайшее гашение произойдет при

$$\Delta x \cdot \Delta k = 2\pi$$

Можем делать и наоборот - гасить все за пределами Δx.

$\forall$ волновой пакет волн де-Бр.

$$p = \hbar k, \quad p + \Delta p = \hbar (k + \Delta k)$$

$$\Delta x \Delta p = 2\pi\hbar = h$$ - принцип неопр-ти Гейзенберга.

В дек системе

$$\Delta x \Delta p_x = h;$$

$$\Delta y \Delta p_y = h$$

$$\Delta z \Delta p_z = h$$

$\Rightarrow$ в силу волновых св-в частиц микромира, мы не можем для них точно опр-ть координату и импульс.

У микрочастиц нет траектории.

④ Волновая функция, ее физический смысл и свойства.

Волна де Бройля наз-ся волновой ф-й
Физ. смысл волновой функции - описание вероятности нахождения частицы в конкретной точке пространства.
Она не описывает реальных процессов, происходящих в пр-ве и времени.
В ∀ физ. теории должны быть опр-ны
1) величины, характеризующие состояние системы в некоторой точке пр-ва в некоторой момент времени.
2) Ур-е движения, опис-е ~~со~~ изменения состояния системы во времени
3) Физические величины, доступные измерению, и метод их вычисления в заданном состоянии системы.
(для экспериментального подверждения теории)

В классической механике

1) $x,\ v = \dot{x},\ p = mv$

2) $\dot{p} = F = m\ddot{x}$

3) $x(t)$ (траектория) ; $p(t)$

Квантовая механика

1) $\Psi(x, y, z, t)$ - комплексная волна вероятности

2) Ур-е Шред (нерелят), ур-е Дирака (релят)

3) Из ~~ур~~ волновой ф-ии, явл-ся реш-м ур-я Шред-ра для данного состояния, мы вычисляем некоторые средние значения, которые можно измерить

<u>Физ. смысл</u> Ψ: $|\Psi|^2 = \Psi\Psi^* = \frac{dW}{dr}$ - плотность вероятности

<u>Условия на Ψ</u>

1) Непрерывность и однозначная опр-ть в заданной области пространства

Физ смысл - частицы не исчезают в никуда -

и не появляются из ничего.

2) Непрерывность производных по времени и координате (и однозначность!)

Физ. смысл - равномерное изменение импульса

3) Нормировка $\int\limits_{\mathbb{R}^3(\Omega)} \Psi\Psi^* dV = 1$ - если частица сущ-т, то где-то она точно находится.

Если все эти усл-я выполнены, то $\int\limits_{\Omega} \Psi f \Psi^* \, dV = \langle f \rangle$ - ср. значение функции f в этой области.

5. Уравнение Шредингера. Связь с законом дисперсии для волн де Бройля
Собственные значения и соб. ф-ии —

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

$\Psi(\vec{r},t) = A e^{-i(\omega t - \vec{k}\cdot\vec{r})}$ — волна де Бройля

$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -i\omega\Psi$, $\frac{\partial \Psi}{\partial x} = ik_x\Psi$; $\frac{\partial^2\Psi}{(\partial x)^2} = -k_x^2\Psi$

$E_{\text{св частицы}} = \hbar\omega$; $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ — по спр ю волны де Бр.

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

дисперсионное соотношение для волн де Бройля для свободной частицы

Выразим все через $\Delta\Psi, \dot{\Psi}$ — получим ур-е Шред-ра.

$\omega = i\frac{1}{\Psi}\dot{\Psi}$; $k_x^2 = -\frac{1}{\Psi}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}$

$\Rightarrow \hbar\omega = \frac{i\hbar}{\Psi}\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m\Psi}\Delta\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m\Psi}\left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}\right)$

$\Rightarrow$ для свободной частицы из ~~[illegible]~~ дисперсионного соотнош. е для волн де Бройля получаем ур. е Шредингера

$$\boxed{i\hbar\dot{\Psi} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi}$$

* теперь частицу в некоем поле V

$$E - V = \frac{p^2}{2m} \quad E = \hbar\omega;\ p = \hbar k,$$

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

$$\boxed{\frac{i\hbar}{\Psi}\dot{\Psi} - V = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\Psi}\cdot\Delta\Psi}$$ – ур-е Шред для частицы в поле.

$$\boxed{i\hbar\dot{\Psi} = V\Psi - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi}$$ – его каноничная форма

нестационарное ур-е Шред.

∃ теперь $V = V(r)$ – стационарное (не зависящее от вр) поле.

Используем для Ψ метод разд-я пер-й $\Psi(r,t) = \psi(r)\cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$

подставляя в нестац-е ур-е, получаем:

$$E\Psi(r,t) = V\Psi(r,t) - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(r)\cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

Сокращаем всюду экспоненты и получаем

$$E\psi(r) = V\psi(r) - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(r)$$

$$(E - V)\psi(r) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(r)$$

$$\underline{\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\psi(r) = 0} \quad (V)$$ ур-е Шред.

Т.е представление ~~реш~~ волн. ф-ии

в случае стац $V(r)$ в виде $\Psi(r,t)=\psi(r)\cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$
возможно только если E является
[redacted] решением ур-я (V)

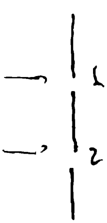
$$\rightarrow \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla + V(r)\right]\psi(r) = E\,\psi(r)$$

т.е E должно быть собственными числами, а $\psi(r)$ - соб ф-ми, соотв-ми этим соб-м реш-и для оператора

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla + V(r)\right]$$

E будет энергией стац-го сост-я

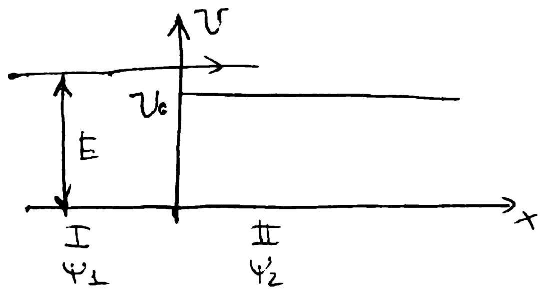
Принцип суперпоз-ии для ψ
Ур-е Шредингера линейно по ψ,
$\Rightarrow$ если ψ_1, ψ_2 - решения, то $\psi_3 = c\psi_1 + d\psi_2$ тоже будет решением
Это объясняет дифракцию электронов



$$\left\{\begin{aligned} \frac{dW_1}{dV} &= |\psi_1|^2 \\ \frac{dW_2}{dV} &= |\psi_2|^2 \end{aligned}\right. \qquad \frac{dW}{dV} = |c\psi_1 + d\psi_2|^2$$

⑥ Движение частицы в поле потенциального барьера. Коэффициенты отражения и прохождения в подбарьерном случае. Коэф-т отр-я от барьера бесконечной толщины

Мы ✱ барьер бесконечной ширины:



✱ 2 области $x<0,\ V=0;\quad x\geq 0,\ V=V_0$

В классике: $E>V_0$ - прох. $E<V_0$ - не прох.

В квантовой физике 1) $E>V_0$

$$\frac{d^2\psi}{\partial x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-V)\psi=0 \qquad \psi=\psi(x)\ (\text{✱ одном. дв-е})$$

$$\Psi(x,t)=\psi(x)\,e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

! $\Psi(x,t)$ - непр. вместе с производными.

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}E\psi=0 \quad - \text{ в I}$$

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-V)\psi=0 \quad - \text{ в II}$$

$p = \sqrt{2mE} = \hbar k \Rightarrow k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

I: $k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{h} = \frac{2\pi}{\lambda_1}$

II $k_2 = \frac{\sqrt{2m(E-U)}}{\hbar} = \frac{2\pi}{\lambda_2}$

λ_1, λ_2 - длины волн де Бр.

$\Rightarrow$ I $\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + k_1^2 \psi_1 = 0$

II $\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + k_2^2 \psi_2 = 0$

Частные реш-е ур-й такого вида $\psi \sim e^{\pm ikx}$

$$\begin{cases} \psi_1 = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ikx_1} \\ \psi_2 = A_2 e^{ik_2 x} + \cancel{B_2} e^{-ik_2 x} \end{cases}$$
$B_2 = 0$ т.к барьер беск. толщины.

A_1 - волна, пришедшая к барьеру;

B_1 - волна, отр-е от барьера

A_2 - волна, прошедшая внутр

$\exists A_1 = 1$, тогда (интенсив. пад. волны)

$$\begin{cases} \psi_1 = e^{ik_1 x} + b_1 e^{-ikx_1} \\ \psi_2 = a_2 e^{ikx_2} \end{cases}$$

Гран усл-е: $\psi_1(0) = \psi_2(0)$; $\frac{\partial \psi_1}{\partial x}(0) = \frac{\partial \psi_2}{\partial x}(0)$

$1 + b_1 = a_2$, $k_1 - b_1 k_1 = a_2 k_2$

$$\begin{cases} b_1 = a_2 - 1 \\ a_2 = \dfrac{k_1}{k_2}(1 - b_1) \end{cases} \qquad b_1\left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right) = \frac{k_1}{k_2} - 1 \qquad b_1 = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}$$

$$\begin{cases} b_1 = \dfrac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \\ a_2 = \dfrac{2k_1}{k_1 + k_2} \end{cases}$$

Получаем, что коэф-т отр-я от беск-го барьера равен $R = b_1^2 = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2 = \frac{v_1 b_1^2}{v_1 1^2}$

Коэф-т прох-я $D = \frac{I_{прош}}{I_{пад}} = \frac{v_2 a_2^2}{v_1 \cdot 1} = \frac{k_2}{k_1} a_2^2 =$

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

$$\boxed{R = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2; \quad D = \frac{4 k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}} \; ; \; R + D = 1$$

2) if $E = U_0$ $\quad k_2 = 0$, $R = 1$

3) if $E < U_0$

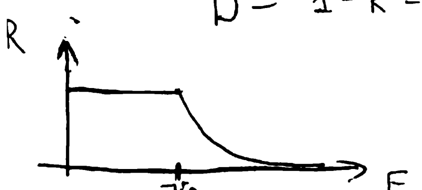
$$k_2 = \frac{i\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar} = i\kappa$$

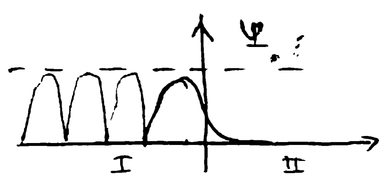
$\psi_2 = a_2 e^{+ik_2 x} = a_2 e^{-\kappa x}$ - нет колеб-й,

так как нет x

Отр: $R = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2 = \left(\frac{k_1 - i\kappa}{k_1 + i\kappa}\right)^2 = 1$

$$D = 1 - R = 0$$





Разберемся с D и Ψ_2. Тут случай аналог. ПВО

$$\Delta P_x \Delta x \geq \hbar$$

$$D = \frac{4ik_1k}{(k_1+ik)^2} \quad V_0 \to \infty \quad k \to \infty \quad D \to 0$$

$$\Psi_2 = a_2 e^{-kx} \to 0$$ – при ∞ пот. барьере прошедшей волны не будет.

* Частицу в $[0;\Delta x]$

$$\Rightarrow \Delta P_x = \frac{\hbar}{\Delta x}$$

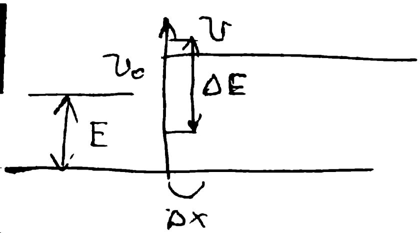
$$\Rightarrow \Delta E = \frac{\Delta P_x^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m\Delta x^2}$$

$|\Psi_2|^2 = a_2^2 e^{-2kx} = \frac{dW}{dV}$ – плотность вероятности обнаружения частицы справа.

$\exists\ 2k\Delta x \approx 1$

$$\Delta x \approx \frac{1}{2k} = \frac{\hbar}{2}\frac{1}{\sqrt{2m(V_0-E)}}$$

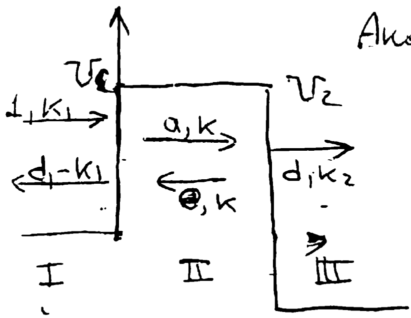
$$\Delta E \geq \frac{\hbar^2}{(\Delta x)^2 2m} = \frac{\hbar^2 4 \cdot 2m(V_0-E)}{2m\hbar^2} = 4(V_0-E)$$



То есть если мы предположим что волна туда прошла, мы автоматически получим допуск по энергии?

7) Туннельный эффект. Коэффициент прохождение

Туннельной эффект — прох-е частицы ~~с энергией~~ через барьер конечной толщины, высота которого больше, чем энергия частицы



Аналогично

I, III $\quad \psi''_{1x} + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi_1 = 0$

II $\quad \psi''_{2x} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)\psi_2 = 0$

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

$$k_2 = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E - V_0)} = ik.$$

Можем расписать ур-е для ψ, ψ'_x и найти d_1, a, b, d, но можно проще.

∢ левую границу барьера. Примем ее за начало координат. К ней подходят 2 волны $(1, k_1)$ и $(b, -k)$

В результате должны получиться $(d_1, -k_1)$ в первой обл и (a, k) во II

$\Rightarrow\ r = r_1 + d_1' b\ ;\quad a = d_1 + r_1' b$ (1) r_1 - коэф. отр
d_1 - коэф. прох

На второй границе $x^* = x' + l$

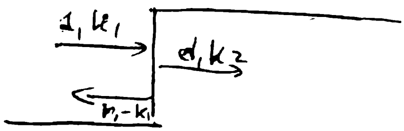
$\Rightarrow$ Волны, сх-ся там, будут

$$a e^{ikx};\quad b e^{-ikx};\quad d e^{ik_2 x}$$

$$\to (a e^{ikl}) e^{ikx'};\quad (b e^{-ikl}) e^{-ikx'};\quad (d e^{ik_2 l}) e^{ik_2 x'}$$

$$\Rightarrow \left.\begin{aligned} d e^{ik_2 l} &= d_2 a e^{ikl} \\ b e^{-ikl} &= r_2 a e^{ikl} \end{aligned}\right\} (2)$$

Формулы 1, 2 мы получили по аналогии с беск. барьером



$$\begin{cases} r = r_1 + d_1' b \\ a = d_1 + r_1' b \\ d e^{ik_2 l} = d_2 a e^{ikl} \\ b e^{-ikl} = r_2 a e^{ikl} \\ r_1' = -r_1 \\ r_1^2 + d_1 d_1' = 1 \end{cases}$$

$$r = \frac{r_1 + r_2 e^{2ikl}}{1 + r_1 r_2 e^{2ikl}};\quad d = \frac{d_1 d_2 e^{-i(k_2 - k)l}}{1 + r_1 r_2 e^{2ikl}}$$

$\to \exists\ k_1 = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(\mathcal{E}-U_1)}\ ;\ k_2 = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(\mathcal{E}-U_2)}$

$k = i\alpha;\ \alpha = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(U-\mathcal{E})}$

$$r_1 = \frac{k_1-k}{k_1+k} = \frac{k_1-i\alpha}{k_1+i\alpha};\quad r_2 = \frac{k-k_2}{k+k_2} = \frac{i\alpha-k_2}{i\alpha+k_2}$$

$$d_1 = \frac{2k_1}{k_1+k} = \frac{2k_1}{k_1+i\alpha};\quad d_2 = \frac{2k}{k+k_2} = \frac{2i\alpha}{k_2+i\alpha}$$

$$D = \frac{k_2}{k_1}|d|^2 = \frac{k_2}{k_1}d\,d^*$$

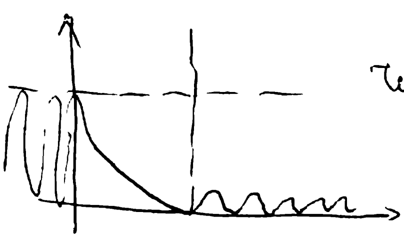
$$D = \frac{16 k_1 k_2 \alpha^2}{(k_1^2+\alpha^2)(k_2^2+\alpha^2)(e^{2\alpha l}+e^{-2\alpha l}) + 2(\alpha^2-k_1k_2)}$$

Пренебрегая $e^{-2\alpha l}$ в знаменателе, пренебрегая слагаемым $2(\alpha^2-k_1k_2)$, получаем $D = D_0 e^{-2\alpha l} = D_0 \exp\left[-\frac{2l}{\hbar}\sqrt{2m(U-E)}\right]$

$D_0 \sim 1$

Можно рассматривать барьер не прямоуг. формы, разбивая его на „ступеньки"

$$D = D_0 \exp\left[-\int_{x_1}^{x_2} \frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U-E)}\,dx\right]$$



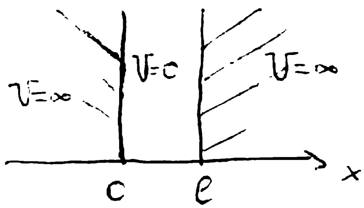
Чем меньше толщина барьера и разность $(U-E)$, тем выше коэф-т прозр-ти.

Коэф-т прозр-ти резко уменьш-ся

при увеличении массы частицы
Явление туннельного эффекта
используется в холодной
эмиссии и туннельном микроскопе

8) Квантование энергии. Частица в потенциальной яме с бесконечными стенками. Характер энергетического спектра линейного гармонического осциллятора

∢ частицу в потенциальной яме с ∞ высокими стенками.



$x \in (-\infty, 0] \cup [l; +\infty)$ - нет частицы

$x \in [0, l]$ - есть частица

∢ область, где частица есть:

$$\frac{d^2\psi}{(dx)^2} + \underbrace{\frac{2mE}{\hbar^2}}_{k^2}\psi = 0 \qquad k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}; \quad \psi(0) = \psi(l) = 0$$

Возьмем в кач-ве $\Psi(x) = a\sin(kx + \alpha)$ - явл-ся решением ур-я. Применим гр. усл:

Т.к $\psi(0) = 0 \Rightarrow a\sin(\alpha) = 0 \Rightarrow \alpha = 0$

$\psi(x) = a\sin(kx)$

Т.к $\psi(l) = 0 \Rightarrow a\sin(kl) = 0 \Rightarrow kl = \pm\pi n$

($kl \neq 0$, т.к иначе это неинтересное тривиальное решение)

$\Rightarrow \psi = a \sin\left(\frac{\pi n}{l} x\right)$

Получается, что $k = \frac{\pi n}{l} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$;

$\Rightarrow \boxed{E = \frac{\pi^2 n^2}{2ml^2} \hbar^2 \quad n = 1, 2, \ldots}$

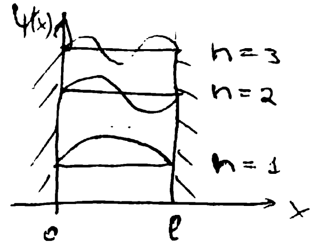
Т.к n пробегает дискретный ряд значений, то ~~и~~ E ~~также~~ имеет дискретный ряд значений

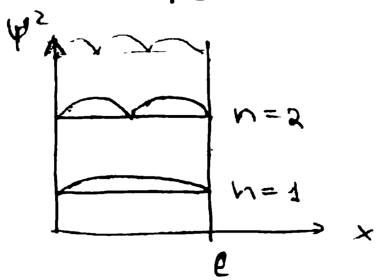
Найдем a из условие нормировки.

$$\int_0^l \psi^2 dx = 1 = a^2 \int_0^l \sin^2 \frac{\pi n x}{l} dx = a^2 \frac{l}{2}.$$

$\Rightarrow a = \sqrt{\frac{2}{l}}$

$$\psi = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\left(\frac{\pi n}{l} x\right)$$





! В рамках задачи с ∞ пот-й ямой частица не может нах-ся в точке $l/2$ на втором уровне энергии

Оценим плотность спектра

$\exists\, l = 1$ см; $m = 10^{-27}$ г, $\hbar = 10^{-27}$ эрг с $\Rightarrow$

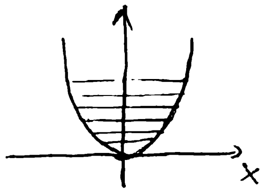
$E = n^2 \cdot 5 \cdot 10^{-27}$ эрг, $\Delta E_n \approx 6 \cdot 10^{-5} n$ (эВ)

В атоме $\ell \sim 10^{-7}$ см $\Rightarrow E_n \approx 0{,}34 \cdot n^2$ эВ.

В ямах конечной глубины происх-т расползание, но оно затухает $\sim e^{-\alpha x}$

Характер энергетического спектра линейного гармонического осциллятора

$U = \frac{kx^2}{2}$



Не решать

Энергетический спектр частот кратен основанию: $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$

$$V = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$$

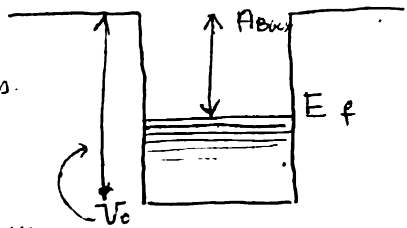
$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{m\omega^2 x^2}{2}\right)\psi = 0$$

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

(9) Контактная разность потенциалов. Автоэлектронная эмиссия

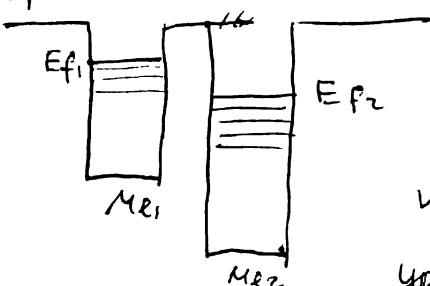
Контактная разность потенциалов.

* для опис. е электронов в Ме след. модель



Уровни с нулевого по ур. Ферми (уровень с энергией Ef) заполнены. ~~Что~~ (по 2 разноспиновых на уровень). Чтобы выходить электрон из Ме, нужно совершить работу $A = V_0 - E_f$.

* 2 сблизившихся метала с разными уровнями Ферми. (∃ $E_{f1} > E_{f2}$).

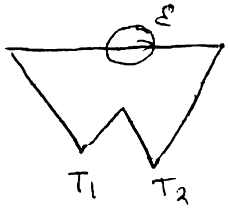


Электроны перех-т из Me_1 в Me_2 на более низкий энерг. уровень.

$U_{кпр} = A_{B_1} - A_{B_2}$ - за счет тока электронов из Me_1 в Me_2. В результате КПР возникает

? КПР = f(T), т.к положение уровня Ферми зависит от T

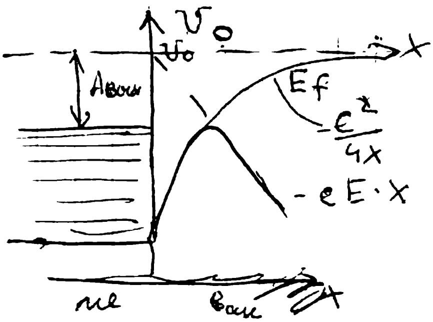
Для одинаковых металлов



$T_1 = T_2$ $\mathcal{E} = 0$ Термопара

$T_1 \neq T_2$ $\mathcal{E} \neq 0$

2) Автоэлектронная эмиссия.

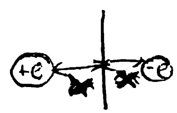


1) Притяжение эл-в металлом

$F = \frac{e^2}{4x} = -\frac{dU}{dx}$

$E_1 = -\int \frac{e^2}{4x^2}dx = -\frac{e^2}{4x}$

Сила F возникает из-за притяжения электрона вир-т. положит-м зарядом, появляющимся на его месте



2) Если приложить поле, то на внешний электрон будет действовать сила $-eE$, а энергия этого взаимодействия $-eEx$

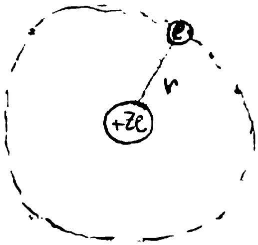
В итоге $U = U_0 - eEx - \frac{e^2}{4x}$

$\max U(x_0)$: $\{\frac{dU}{dx} = 0 = x_0 = \sqrt{\frac{e}{4E}}\}$

$U(x_0) = U_0 - \sqrt{Ee^3}$ - нет АЭЭ. Иначе бы новый барьер ниже и выйти через нас легче

(10) Нормальное состояние водородоподобного атома. Полуклассическая теория Бора. ~~Пост~~ Обобщенная формула Бальмера.

Мы будем 4 ид. сферически симметричный атом, состоящий из ядро и одного $\bar{e}$



Полуклассическая теория Бора

1) Атомы могут длительное время находиться в стационарных состояниях, в этих состояниях они не излучают;

2) При переходе из одного сост-е в другое атом излучает квант света, энергия (стац. состояние = стац. орбита) которого

$$h\nu = E_m - E_n$$

Условие существования орбит: на стац. орбитах момент импульса электрона кратен $\hbar$: $\underline{mvr = n\hbar}$ усл-е стац-ти Бора

Вспомним Де-Бройля:

$$\lambda_Б = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{2\pi\hbar}{mv}, \quad mv = \frac{\hbar 2\pi}{\lambda}$$

$\Rightarrow mvr = \frac{2\pi\hbar}{\lambda}\cdot r$

$\Rightarrow \hbar n = \frac{2\pi\hbar}{\lambda} r$,

$\Rightarrow \boxed{2\pi r = n\lambda}$ — на стац. орбите уклад-ся целое число волн де-Бройля

Найдем равновесной радиус орбиты.

$\frac{mv^2}{r} = \frac{Ze^2}{r^2} \Rightarrow r = \frac{Ze^2}{mv^2}$, $m^2v^2 = \frac{n^2\hbar^2}{r^2}$ (по Бору)

$r = \frac{mZe^2}{n^2\hbar^2} r^2 \Rightarrow \boxed{r = \frac{n^2\hbar^2}{mZe^2}}$

Найдем теперь энергию электрона, находящегося на ~~первой~~ стационарной орбите.

$E = E_{пот}+E_{кин} = -\frac{Ze^2}{r} + \frac{mv^2}{2} = -\frac{Ze^2}{r} + \frac{Ze^2}{2r} = -\frac{Ze^2}{2r} =$

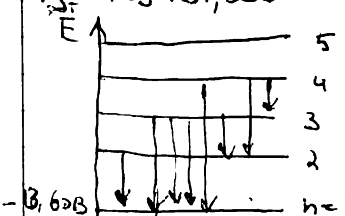
$= \boxed{E = -\frac{Z^2e^4m}{2n^2\hbar^2}}$ энергия атома на стац. орбите.

Найдем частоту изл-я при переходе с E_1 на E_2

$\hbar\omega = E_1 - E_2 = -\frac{Z^2e^4m}{2\hbar^2}\left(\frac{1}{n_1^2}-\frac{1}{n_2^2}\right) = \frac{hc}{\lambda} \Rightarrow$

$\frac{1}{\lambda} = \frac{Z^2e^4m}{4\pi\hbar^3 c}\left(\frac{1}{n_2^2}-\frac{1}{n_1^2}\right) = R_\infty\left(\frac{1}{n_2^2}-\frac{1}{n_1^2}\right)$ — формула Бальмера

$R = 109737,303$ см$^{-1}$, $R_{эксп} = (109737,309 \pm 0,012)$ см$^{-1}$

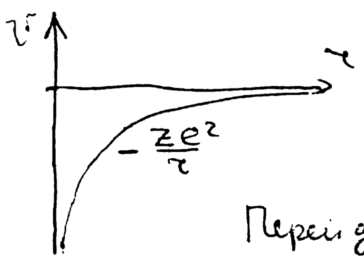


R - пост-е ридберга

$R = \frac{R_\infty}{1+m/M}$, R_∞ - $M \to \infty$

n=1 серия Лаймана - ультрафиолет

(11) Уравнение Шредингера для нормального состояния водородоподобного атома, его энергия и распределение электронной плотности



Ур-е Шредингера:

$$\Delta\Psi + \frac{2m}{\hbar}(E - V)\Psi = 0$$

$$\Delta\Psi + \frac{2m}{\hbar}\left(E + \frac{Ze^2}{r}\right)\Psi = 0$$

Перейдем в сферич. систему:

$$\Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

$$dV = r^2 dr \sin\theta\, d\theta\, d\varphi;$$

$$r \in (0,\infty),\ \varphi \in [0;2\pi),\ \theta \in [0,\pi]$$

Возьмем нормальное состояние водородоподобного атома $(n=1)$, тогда $\Psi = \Psi(r)$, т.к у нормального сост-я есть только круговые орбитали

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\Psi(r)\right) + \frac{2m}{\hbar}\left(E + \frac{Ze^2}{r}\right)\Psi = 0$$

$$\frac{1}{r^2}\left(2r\frac{\partial}{\partial r}\Psi(r) + r^2\frac{\partial^2}{\partial r^2}\Psi(r)\right) + \frac{2m}{\hbar}\left(E + \frac{Ze^2}{r}\right)\Psi = 0$$

$$\frac{d^2\Psi}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}\Psi(r) + \frac{2m}{\hbar}\left(E + \frac{Ze^2}{r}\right)\Psi = 0$$

$$\frac{d^2\psi}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d\psi}{dr} + \left(\gamma + \frac{2\alpha}{r}\right)\psi = 0$$

$\measuredangle\ \psi = Ae^{-\varepsilon r}$: $\varepsilon^2 - \frac{2\varepsilon}{r} + \gamma + \frac{2\alpha}{r} = 0$, $\gamma = \frac{2mE}{\hbar}$,

$\Rightarrow \varepsilon^2 = -\gamma$, $\varepsilon = \alpha$ $\qquad \alpha = \frac{mze^2}{\hbar^2}$

$\Rightarrow -\gamma = \alpha^2 \quad \frac{2m}{\hbar^2}E = -\frac{m^2}{\hbar^4}\cdot\left(\frac{ze^2}{1}\right)^2$

$\Rightarrow E = \frac{mz^2e^4}{2\hbar^2}$ – получаем ту же формулу для энергии, что и у Бора

Распределение электронной плотности

Найдем вер-ть нах-я электрона в объеме dV

$$\frac{dW}{dV} = \psi^2 = A^2 e^{-2\varepsilon r} = A^2 e^{-2\alpha r}$$

$$\Rightarrow dW = \psi^2 dV = A^2 e^{-2\alpha r} r^2 \sin\theta\, d\theta\, d\varphi\, dr$$

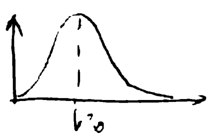
Вероятность нах-я электрона в интервале

$r; r+dr \qquad \rho(\tau) = A^2 e^{-2\alpha r} dr \int_0^{\pi} \sin\theta\, d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi = \underline{A^2 e^{-2\alpha r}\cdot 4\pi r^2 dr}$

Найдем максимум $\rho(\tau)$:

$\rho'(\tau) = 0 = -A^2 2\alpha e^{-2\alpha r}\cdot 4\pi r^2 dr + 2rA^2 e^{-2\alpha r} 4\pi dr$

$2r - 2\alpha r^2 = 0 \qquad r_0 = \frac{1}{\alpha} = \frac{\hbar^2}{mze^2}$



Мы опять совпали

с Бором: $r = \frac{\hbar^2 n^2}{mze^2} = \frac{\hbar^2}{mze^2} \quad n = 1$

? Отличие подходов Максвелла и Бора в том, что по Бору мы утверждаем, что электрон сидит только на этом расстоянии от ядра при $n = 1$, а по Максвеллу - что на таком расстоянии наибольшая вероятность его обнаружить

Найдем A

$$\int_0^\infty \Psi^2 dV = 1 = \int_0^\infty A^2 e^{-2r\alpha} r^2 dr \cdot 4\pi \Rightarrow$$

$$\Rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}$$

Теперь через Ψ можно искать средние значения

$$\langle r \rangle = \int_0^\infty r \Psi^2 dr = \frac{3}{2} a_0$$

(12) Движение в кулоновском поле (общий случай). Уравнение для угловой и радиальной составляющих волновой функции. Пространственное квантование.

∃ общий, не сф. симметричный случай движения электрона в пот. поле ядра.

$$\Delta\Psi + \frac{2m}{\hbar}\left(E + \frac{e^2 z}{r}\right)\Psi = 0$$

$$\exists\ \Psi = R(r)\cdot Y(\varphi,\theta)$$

$$\Delta(R(r)\cdot Y(\varphi,\theta)) + \frac{2m}{\hbar}\left(E + \frac{e^2 z}{r}\right) R\cdot Y = 0$$

$$\frac{Y}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}R\right) + \frac{R}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right) + \frac{R}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2} +$$

$$+ \frac{2m}{\hbar}\left(E + \frac{e^2 z}{r}\right) YR = 0 \quad \Big|\cdot\frac{r^2}{RY}$$

$$\frac{1}{R}\left\{\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + \frac{2m}{\hbar}\left(Er^2 + e^2 z r\right)\right\} =$$

$$= \frac{1}{Y}\left(\frac{1}{\sin\theta}\cdot\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2}\right)$$

Правая часть зависит только от r, левая – только от θ, φ => они обе равны $\beta = const$

∃ п.ч.: $\underbrace{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2}}_{\text{ур-е Лежандра}} = -\beta Y$.

$\Lambda Y = \beta Y \to \beta$ – соб. значение ур-я

Лежандра, $\beta = \ell(\ell+1)$

У - соб ф-ии ур-я Лежандра, $Y = \Theta_{\ell m} e^{im\varphi}$

ℓ - орбитальное квантовое число,

m - магнитное квантовое число.

$\ell = 0, 1, \quad , n-2, n-1 \qquad m = \pm \ell; \pm(\ell-1), .. 0$

* ур-е для r:

$$\frac{\partial^2 R}{\partial r} + 2/r \frac{\partial R}{\partial r} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E + \frac{e^2 z}{r}\right)R = R\,\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}$$

$$R'' + \frac{2}{r}R' + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E + \frac{e^2 z}{r} - \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2}\right)R = 0$$

Получаем ур-е Шредингера с новым потенциалом: $V^* = -\frac{e^2 z}{r} + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2}$

В механике такой ~~потенциалом~~ энергией обладает вращ-е движение

$$E_{вр} = \frac{L^2}{2I} = \frac{L^2}{2mr^2}$$, L - момент импульса =>

$$L = \sqrt{\ell(\ell+1)}\cdot\hbar$$

$\exists R = Ae^{-\beta R}$

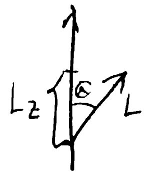
$$\beta^2 - \frac{2}{r}\beta + \frac{2m}{\hbar^2}E + \frac{2me^2 z}{\hbar^2 r} - \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2} = 0$$

$$\Rightarrow E = \frac{1}{2}\frac{me^4 z^2}{\hbar^2} \quad n=1 \quad \ell=0 \; ! \quad \to 0$$

=> для ~~сост~~ n=1 все опять совпало с Бором

Пространственное квантование

Вспомним ларморову прецессию:



$\bar{\mu}_{орб} = g\bar{L} = \frac{e}{2mc}\bar{L}$ - гиромагн. соотн. е

$U = -(\bar{\mu}\bar{B}) = -\mu B\cos\theta = -gLB\cos\theta =$

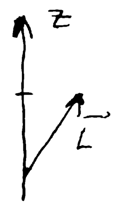
$= -gB\,L_z$

Прецессия в классике - движение с сохранением $|\bar{L}|$ и L_z

В квантовой физике мы получаем что

1) Длина L дискретна (простр. е квантов. е

$L = \hbar\sqrt{(l+1)l}$, $L_z = m\hbar$

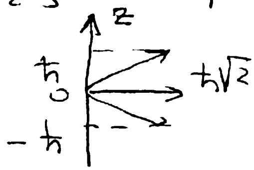


n	l	L	L_z	m
1	0	0	0	0
2	0	0	0	0
	1	$\hbar\sqrt{2}$	$\hbar$ 0 $-\hbar$	1 0 -1
3	0	0		0
	1	$\hbar\sqrt{2}$	$\hbar$ 0 $-\hbar$	1 0 1
	2	$\hbar\sqrt{6}$	0 $\hbar$ $2\hbar$ $-2\hbar$ $-\hbar$	0 1 2 -2 -1

- 1 S сост

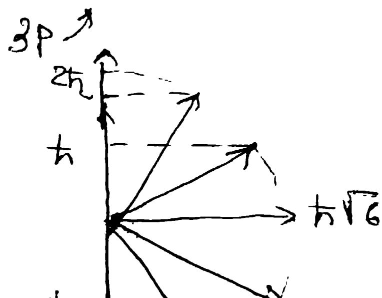
2 S

2p



3d

3p



Проекции L_x, L_y не определены, поэтому для них нет кв. чисел

В классике $\langle L_x \rangle, \langle L_y \rangle = 0$

В итоге 1) $|L|$ квантован

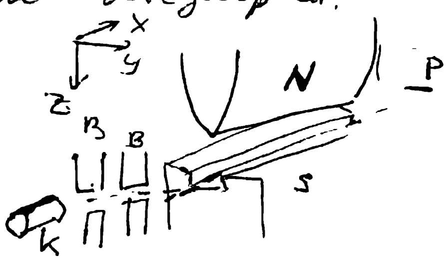
2) Проекции L_z могут принимать только определенные значения

13) Опыт Штерна и Герлаха. Спин. Опыт Эйнштейна-де Гааза. Спин-орбитальное взаимодействие.

Опыт Штерна и Герлаха

Опыт доказал наличие у атомов магнитных моментов.

Опыт: в сосуде с высоким вакуумом создавался с помощью диафрагм B и B' резко ограниченный атомный пучок исследуемого элемента, испаряющегося в печи K. Пучок проходил через сильное магнитное поле H между полюсными наконечниками N и S электромагнита. Засчет формы наконечников поле получалось сильно неоднородным.



1) С т. зр классической электродинамики:

$$f = (\mu \nabla) H$$

$$f_z = \mu_x \frac{\partial H_x}{\partial x} + \mu_y \frac{\partial H_y}{\partial y} + \mu_z \frac{\partial H_z}{\partial z}$$

Атом совершает прецессию вокруг ~~по~~ оси z, вращаясь с частотой $\Omega = -\frac{eH}{\lambda}$

Для дост. больших ~~[illegible]~~ Ω f_z можно усреднять по времени, причем

$\langle f_x \rangle, \langle f_y \rangle = 0$, $\underline{\langle f_z \rangle = m_z \frac{\partial H_z}{\partial z}}$

Эта формула может быть получена и из квантовых соображений.

Определенное значение у момента импульса атома имеет только составляющая L_z => $\mu = gL$ имеет опр-ю компоненту μ_z, μ_x, μ_y - мин-сл => $\langle \mu_x \rangle, \langle \mu_y \rangle = 0$

=> $\langle f_z \rangle = m_z \frac{\partial H_z}{\partial z}$

В итоге, т.к. L_z определяется магнитным ~~орбитальным~~ квантовым числом атома $m = 0, \ldots \pm l$ => при расщеплении (квантовании) f_z должны получаться дискретные полосы в количестве $2l+1$ штук - нечетное число.

В опыте Штерна и Герлаха ~~получилось~~
получилось 2 составляющих
для Ag; H; для других тоже
получались чётные кол-ва
полос => противоречие теории...

После этого добавились результаты
опытов Эйнштейна и де Гааза и
опытов Барнета по опр-ю гиромагн-го
отн-я. (Эйнштейн и де Гааз - установление
связи между L и μ: рассматривали
цилиндр из железа, помещенный в
магнитное поле. Из-за намагнич-я
он начинал вращаться. Барнет - при его
вращении парамагнитные тела намагнич-сь)

~~Это~~ В результате всех этих экспер-в
было получено $g \in \left[\frac{e}{2mc}, \frac{e}{mc}\right]$, причём
для ферромагнетиков оно всегда было
именно $\frac{e}{mc}$ - в 2 раза больше теории!

В опытах Штерна и Герлаха электроны в
атомах водорода

находились в S состоянии - не обладали орбитальным моментом, все для них было расщепление на 2 линии =>
Расщепление обусловлено не орбитальным моментом электрона, а каким-то собственным - спиновым (для серебра все это тоже верно, т.к там только 1 электрон на внешнем слое).
Спин электрона - квантово-релятивистский эффект, не имеющий классического истолкования.
Спин электрона равен $s = \frac{1}{2}$
Максимальное значение проекции s_z равно s, тогда число всех проекций равно $2s+1=2$ (2 из Герлаха - Штерна) $= s = 1/2$)

Спин-орбитальное взаимодействие.
- взаимодействие, обусловленное ^{s}
Спином электрона и зарядом. $s = 1, -1/2$
ядра.
Для атома водорода: электрон вращ-ся
по круговой орбите вокруг ядра, т.е
в с.о электрона ядро вращ-ся вокруг
электрона и создает магнитное поле
Н, воздействующее на спиновый
момент m_s электрона. Т.к заряды
$\bar{e}$ и $\bar{p}$ $-\bar{e} = \bar{p}$, то движ-ся ядро создает
то же магн. поле, что движ-ся электрон.
=> спин-орбитальное взаимодействие -
формально рассматривать как вз-е между
спиновым и орбитальным магн.
моментами электрона.
Спиновой момент электрона m_s может
ориентир-ся или по орб. магн. полю, или
против; в первом случае пот-я
энергия вз-я. ядро-электрон увелич

во втором уменьшается. Поэтому из-за спин-орбитального взаимодействия каждый энергетический уровень атома расщепляется на 2 подуровня. Исключение - атом в S-состоянии. Расщепление энергетического уровня наз-ся тонкой структурой уровня, совокупность подуровней наз-ся мультиплетом.

В случае атомов с одним валентным электроном спин-орбит-е вз-е приводит к тому, что все энергетич-е уровни, кроме S, становятся дублетными.

Величина ΔE за счет спин-орб. вз-я:

$H = e[V r]/cr^3$; $|H| = \frac{\alpha e}{r^2}$, $\alpha = \frac{v}{c}$; $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$

У электрона $E_H = -(\mu_s H)$; $|\mu_s H| = \frac{e\hbar}{2mc}$ - магнетон Бора. По порядку энергии ΔE_H совп-т с ΔE за счет учета завис-ти массы от скорости.

(14) Принцип Паули. Обменное взаимодействие

1) Принцип тождественности.

В системе одинаковых частиц реализуются только такие состояния, которые не меняются при перестановке местами двух частиц.

В классике мы можем следить за тем, как частицы меняются местами и следить за переходами из состояния 1 в состояние 2.

В квантовой механике все не так.

1 $\nwarrow r_1$ 2 $\nearrow r_2$ $\quad \Psi(r_1, r_2) = \Psi(12) \xrightarrow{\hat{P}}$ 2 $\nwarrow r_1$ 1 $\nearrow r_2$ $\quad \Psi(r_2, r_1) = \Psi_{21}$

Введём оператор перестановки $\hat{P}$:

$$\left.\begin{aligned} \hat{P}\Psi_{12} &= a\Psi_{12} = \Psi_{21}; \\ \hat{P}(\Psi_{21}) &= a^2\Psi_{12} = \Psi_{12} \end{aligned}\right\} \Rightarrow a = \pm 1$$

$\Rightarrow \Psi_{12} = \pm\Psi_{21}$ (+ соотв-т симметричной Ψ,
− − антисимметричной)

Для невзаимодействующих частиц

$\Psi_{12} = \varphi_1(1)\cdot\varphi_2(2)$, мы можем записать это так, так как вер-ти перейти с.

$\Psi_{21} = \varphi_1(2)\varphi_2(1)$

$\Psi_s(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\{\varphi_1(1)\varphi_2(2) + \varphi_1(2)\varphi_2(1)\}$

$\Psi_{as}(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\{\varphi_1(1)\varphi_2(2) - \varphi_1(2)\varphi_2(1)\}$

– симметричная и антисимметричная волновые ф-ции.

Принцип Паули для фермионов

В природе встречаются только состояния описывающиеся антисимметричной волновой функцией.

Из этого следует, что в одном состоянии не может нах-ся 2х эл-в с одинаковым набором квантовых чисел: $\Psi_{as}(1,2) = 0$,

[redacted] $\varphi_1 \equiv \varphi_2$, но $\cancel{\varphi = R_n \Theta_{l,m} e^{im\varphi} \Rightarrow}$

~~если~~ $\cancel{n_1 = n_2,\ l_1 = l_2,\ m_1 = m_2,\ s_1\ s_2}$ ~~то~~ $\cancel{\varphi_1 \equiv \varphi_2}$

~~и~~ $\cancel{\Psi_{as}(1,2) = 0}$. $\Psi_{as}(1,2) = \varphi_1(1)\varphi_2(2)$

$\Psi(2,1) =$ $\Psi_{as} = 0$

Фермионы – частицы, состояние которых описывается антисимметричной волновой функцией, бозоны – для которых симметричной

Обменное взаимодействие.

Обменное взаимодействие - специфическое квантово-механическое взаимодействие тождественных частиц, объясняющее изменение энергии системы таких частиц, вызванное требованием симметричности их волновых функций.
Обменное вз-е бозонов эквивалентно эффекту их притяжения. Обменное взаимодействие фермионов эквивалентно их расталкиванию, ~~т.к.~~ (на расстояниях ~ волны де Бр)
$V = V_{основн} + V_{обмен}.$

Концепция обмена возникла при изучении спектров излучения атома гелия; объясняет сущ-е пара-гелия и орто-гелия, различающихся конфигурацией электронов

* уравнение Паули для получения качественного описания структуры атомов. - ур-е Шредингера с доп. слагаемым

в гамильтониане, учитывающем наличие спина:

$$H_e = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{p_i^2}{2m} - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 |r_i|} \right) + \sum_{i<j} \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 |r_i - r_j|}$$

Для двухэлектронной системы волновую функцию можно разделить на 2 сост-е - коорд и спиновую

$$\psi(r_1, s_1, r_2, s_2) = \psi(r_1, r_2)\chi(s_1, s_2)$$

Наиболее простая система, где обменное вз-е играет роль - двухэлектр. система в атоме Водорода и Гелия.

Электроны явл-ся фермионами => функция $\psi(r_1, s_1, r_2, s_2) = -\psi(r_2, s_2, r_1, s_1)$

Ассиметрия может быть получена двумя способами - $\psi(r_1, r_2)$ - сим, $\chi(s_1, s_2)$ - ант; $\psi(r_1, r_2)$ - антисим; $\chi(s_1, s_2)$ - сим

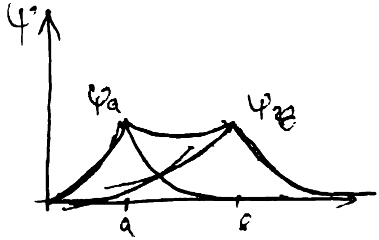
$$\chi_{sym} = \begin{cases} \chi_1(s_1)\chi_2(s_2) \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_1(s_1)\chi_2(s_2) + \chi_1(s_2)\chi_2(s_1)) \\ \chi_1(s_2)\chi_2(s_1) \end{cases}$$ — триплетное сост-е ($S = 1$)

$$\chi_{as} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_1(s_1)\chi_2(s_2) - \chi_1(s_2)\chi_2(s_1))$$ — полный спин равен нулю (синглетное состояние)

$$\Psi_{sym}(r_1, r_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_1(r_1)\psi_2(r_2) + \psi_1(r_2)\psi_2(r_1)\right)$$

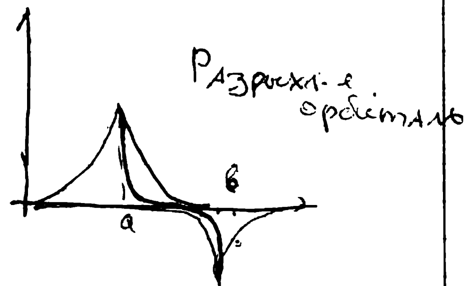
$$\Psi_{as}(r_1, r_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_1(r_1)\psi_2(r_2) - \psi_1(r_2)\psi_2(r_1)\right)$$

Симметричная Ψ простр



Связыв-е орбиталь

Антисимм-е в.ф.



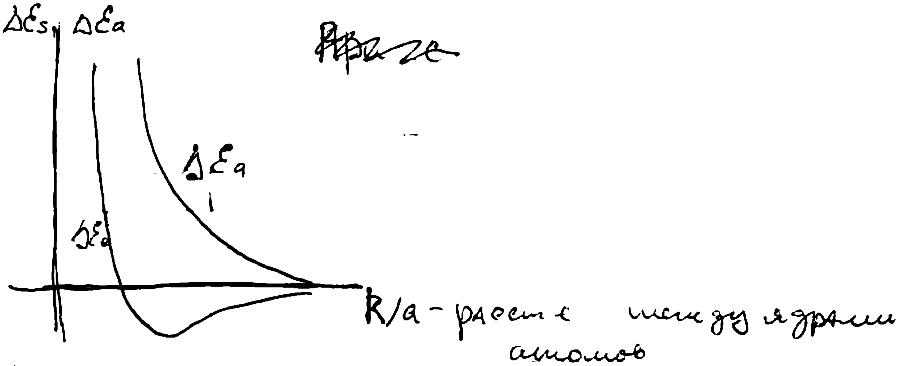
Эта теория объясняет
∃-е ортогелия и парагелия —
у волновой ф-ии есть 2 возможности
быть не симметричной.

Но т.к связывающая орбиталь
обеспечив-т меньшую энергию
сост-я, парагелий, с антисимм-м
спином, встречается чаще, чем
ортогелий с симметричной.

Химические связи

металлич · ионная · ковалентная.

С помощью идеи обменного вз-я (и только с помощью него) можно объяснить ковалентную хим связь. Силы, приводящие к ковалентной связи, явл-ся обменными.



Получается, что минимум энергии, необходимый для получения стабильного сост-я, получается только при симметр простр. сост-й и антисим.

Спиновой — только в синглетном состоянии возможно образование молекулы. В триплетном состоянии все плохо и связь не обр-ся

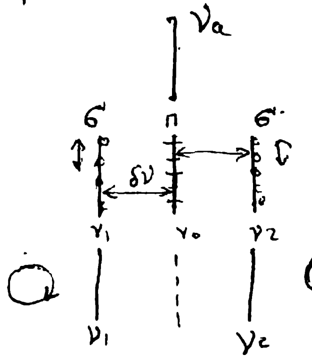
Это видно и из вида орбиталей

по середине между А и В связ-я орбиталь имеет максимум, а разрыхляющая близка к нулю
В синглетном состоянии кулоновское расталкивание ядер при достаточном сближении компенсируется противоположным действием электронов. Посреди ядер находятся электроны, стягивающие их
В триплетном состоянии электроны не будут находиться между ядрами => ядра растолкнутся.

(15) Эффект Зеемана. Магнитный резонанс

Эффект Зеемана.

Простой (нормальный) эффект: – расщепление спектральных линий излучения при наблюдении поперек поля на 3 линейно поляризованные компоненты, причем в средней компоненте эл. вектор поляризован по полю, а в крайних – перпендикулярно полю. При наблюдении по полю получ-ся такое же смещение, но несмещенная компонента отсутствует. Компоненты поляризованы по кругу в противоположных направлениях.



без поля, ν - частота.

спектр поперек поля

спектр вдоль поля

Классическое объяснение - изм.е центры - гарм осцилляторы в виде квазиупр связанн электронов

Без магн. поля

$\ddot{r} + \omega_0^2 r = 0$

С полем: $\ddot{r} + \omega_0^2 r = -\frac{e}{mc}[\dot{r}B]$

$\exists\ \Omega = \frac{e}{2mc} B$

$\ddot{r} + 2[\dot{r}\Omega] + \omega_0^2 r = 0$ $\quad \exists$ ось z напр по B

$\rightarrow \ddot{x} + 2\Omega\dot{y} + \omega_0^2 x = 0$

$\ddot{y} - 2\Omega\dot{x} + \omega_0^2 y = 0$

$\ddot{z} + \omega_0^2 z = 0$ - магн. поле не влияет на дв.е электрона по полю

$\exists\ \xi = x + iy$

$\rightarrow \ddot{\xi} + i2\Omega\dot{\xi} + 2\omega_0^2\xi = 0, \quad \xi = e^{i\omega t}$

$\Rightarrow -\omega^2 + 2\Omega\omega + \omega_0^2 = 0$

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

Для сильных полей Ω мало по ср с ω_0^2

$\Rightarrow \omega = \Omega \pm \omega_0$

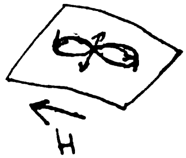
$\exists\ \omega_1 = \omega_0 + \Omega, \quad \omega_2 = \omega_0 - \Omega$

$\xi_1 = e^{i\omega_1 t}; \quad \xi_2 = e^{-\omega_2 t}$

$\Rightarrow$ объясняем $\omega_0 + \Delta\omega$; $\Delta\omega = -\frac{e}{2mch}$

Расклад.е дв.е, опис.е каждой из exp как гарм. ~~~~ ~~дв~~ колебание

~~Кв~~ по напр-ю оси Z и дв-е в XY



Квантовое объяснение: для простого эф. спин не нужен.

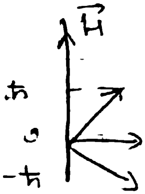
Na: $l=1$ —— p $\begin{matrix} +1 \\ 0 \\ -1 \end{matrix}$ m_l

$l=0$ —— s ——

— получаем 3 значения проекции m_l на напр-е ~~двух~~ действ поля, и все хорошо:

$\omega = \omega_0 - \Omega \Delta m_L$, $\Delta m_L = 0, \pm 1$

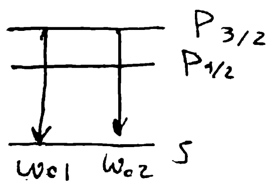
$\omega = \omega_0$; $\omega = \omega_0 \pm \Omega_0$



m_g - полный момент количества движения
$m_g = l + m_s$

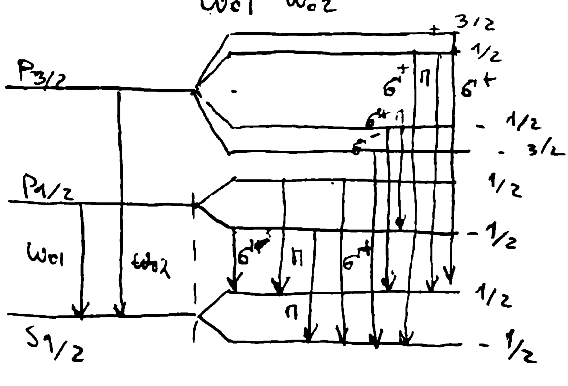
Сложный эффект Зеемана

$H=0$ $\qquad$ $H \neq 0$



$m_g = \pm 3/2, \pm 1/2 \neq 0$!

$m_g = \pm 1/2 \cdot S$



Переходы:
$1 - \sigma^+$
$0 - \pi$
$-1 - \sigma^-$

Магнитный резонанс.

На электронах – ЭПР, на ядрах – ЯПР.

$$\underset{\hbar\Delta\omega}{\overset{\parallel}{U}} = -(\bar{\mu}_s \bar{H}) = -\underbrace{\mu_s H \cos\theta}_{\text{классич}} = -m_s \hbar H$$

$$\rightarrow \quad \Delta\omega = \Delta\omega(\bar{H}, m_s) \Rightarrow$$

Изменяя $\Delta\omega$ можно исследовать квантовую структуру образца.

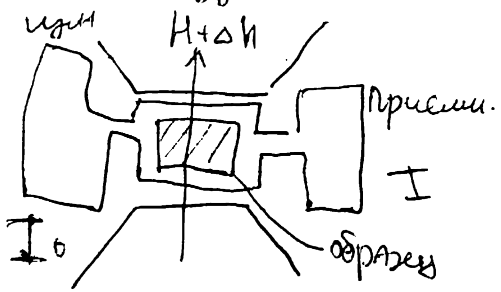
$\dot{J} = [\mu B] = g[JB]$ – ур-е волчка

$\Rightarrow$ J, и μ сов-т прецессию с $\Omega = -gB$

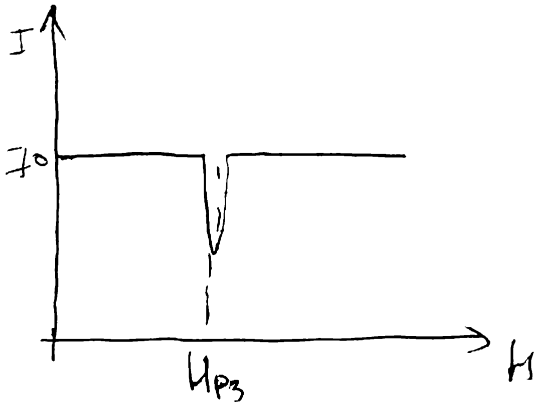
Если потом наложить еще одно поле B', и угловая ск. вр-я Ω' совпадет со ск-ю прецессии, то станет меняться проекция J_z

---

Схема изучения образца методом ЯМР



Подаем пост-е поле и пер-е силу соид-е с частотой ω.



$$\mu_s = \frac{e\hbar}{m_{эл} c}$$

$$\mu_я = \frac{e}{m_я c}$$

Поглощение будет происходить, когда $\hbar\omega$ = энергии расщепления

Поглощение происходит при погл. эл.-маг. из. за перехода между уровнями, получившимися при расщеплении — нах-ся усл. рез. погл.