

В 3. Закон сохранения числа частиц в КМ

$$\frac{\partial a}{\partial t} + \text{div} \bar{j} = 0$$

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U\psi \quad * \psi^*$$

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^* + U\psi^* \quad * \psi$$

$$i\hbar \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} (\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^*)$$

Или

$$\frac{\partial}{\partial t} \underbrace{(\psi \psi^*)}_a = \frac{i\hbar}{2m} \text{div} \underbrace{(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*)}_{\bar{j}}$$

$$\omega = \psi \psi^* \quad \bar{j} = \frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*)$$

4. Скачок потенциала

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U\psi \quad \psi(\vec{r}, t) = \psi(r) e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + (E - U)\psi = 0 \quad \text{- стац. у. Шрёдингера}$$

Одномерный случай

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + (E - U(x))\psi = 0 \quad \text{или} \quad \psi'' + \underbrace{\left(\frac{2m}{\hbar^2} E\right)}_{\varepsilon} - \underbrace{\left(\frac{2m}{\hbar^2} U\right)}_V \psi = 0$$

$$\varepsilon = \frac{2m}{\hbar^2} E \quad V = \frac{2m}{\hbar^2} U$$

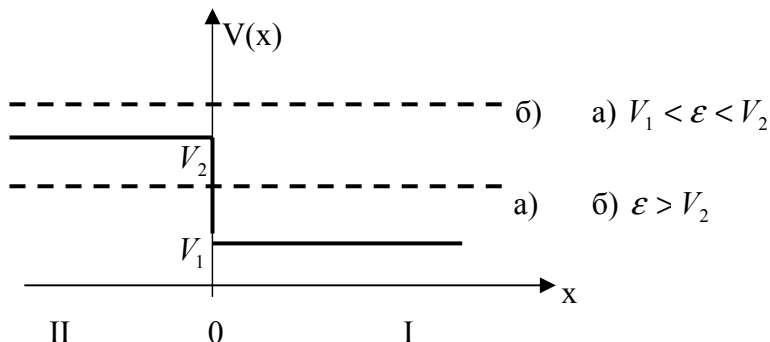
$$\psi'' + (\varepsilon - V)\psi = 0 \quad \begin{cases} \psi'' + k^2\psi = 0, & \varepsilon > V \\ \psi'' + x^2\psi = 0, & \varepsilon < V \end{cases}$$

Если $\varepsilon > V$ решение $\sim e^{\pm ikx}$ - осциляторное

Если $\varepsilon < V$ решение $\sim e^{\pm xx}$ - убывающее

Требования к решению 1) непрерывность ψ, ψ'

2) ограниченность на $\pm \infty$



Случай а) $V_1 < \varepsilon < V_2$

$$\psi = \begin{cases} A_1 \sin(k_1 x + \varphi), & x > 0 \text{ осцилирующий характер} \\ A_2 e^{x_2 x}, & x < 0 \text{ убывающий характер} \end{cases}$$

ГУ – условия на скачке

$$\psi|_{x=+0} = \psi|_{x=-0} \quad (1) \quad \psi'|_{x=+0} = \psi'|_{x=-0}$$

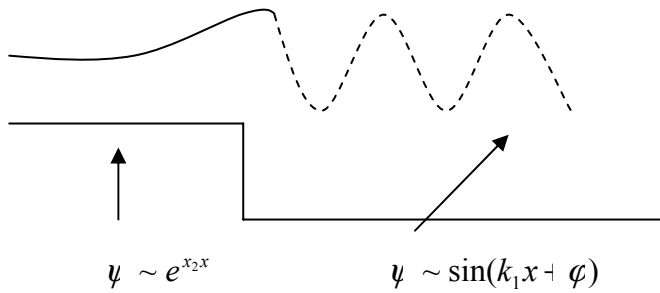
Эти условия можно записать как

$$\frac{\psi'}{\psi}|_{x=+0} = \frac{\psi'}{\psi}|_{x=-0} \quad \text{или} \quad (\ln \psi)'|_{x=+0} = (\ln \psi)'|_{x=-0}$$

Откуда $k_1 \operatorname{ctg} \varphi = x_2$, $\varphi = \operatorname{arccctg} \frac{x_2}{k_1}$ (с точностью до $\varphi \pm \pi n$)

$$\text{Из (1)} \quad \frac{A_2}{A_1} = \frac{k_1}{\sqrt{k_1^2 + x_2^2}} \quad \left(\sin^2 = \frac{1}{\sqrt{1 + \operatorname{ctg}^2}} \right)$$

Напомним, что $k_1 = \sqrt{\varepsilon - V_1}$, $x_2 = \sqrt{V_2 - \varepsilon}$



Случай б) оба решения осцилирующие

$$\psi = \begin{cases} e^{-ik_1 x} + R e^{ik_1 x}, & x > 0 \\ S e^{-ik_2 x} \end{cases}$$

$$1 + R = S \quad (\text{зак. сохр. частиц})$$

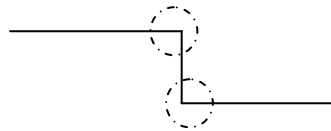
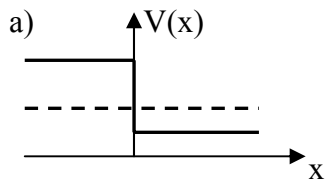
$|R|^2 \sim$ вероятность отразится от барьера

После вычислений (простых, но громоздких)

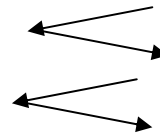
$$R = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}, \quad S = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}$$

Вероятность пройти через барьер $\sim \frac{k_2}{k_1} |S|^2$

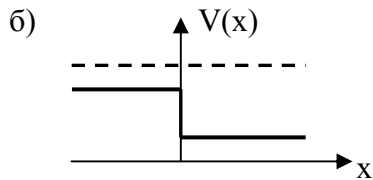
Сравнение с клас. механикой



КМ -
КЛ.М-

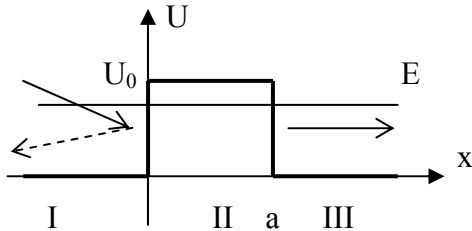


КМ - есть вероятность обнаружить частицу при $x < 0$
КЛ.М - **НЕТ!**



при движении \longrightarrow
КЛ.М - увел. энергии после скачка
КМ - увел. энергии после скачка
при движении \longleftarrow
КМ - есть вероятность отразится
КЛ.М - **НЕТ!**

5. Туннельный эффект



I. $\Psi_1'' + k_1^2 \Psi_1 = 0, k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \equiv k^2$

II. $\Psi_2'' - k_2^2 \Psi_2 = 0, k_2^2 = \frac{2m(U - E)}{\hbar^2}$

III. $\Psi_3'' + k_3^2 \Psi_3 = 0, k_3^2 = k^2$

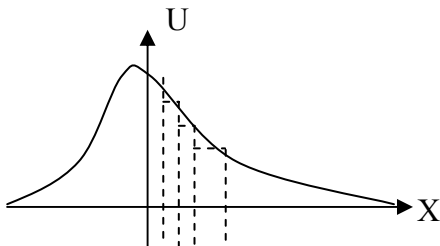
$\Psi_1 = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} \quad \Psi_2 = A_2 e^{-k_2 x} + B_2 e^{k_2 x} \quad \Psi_3 = A_3 e^{ik(x-a)}$

$j_{пад} = \frac{\hbar k}{m} |A_1|^2 \quad j_{отр} = -\frac{\hbar k}{m} |B_1|^2 \quad j_{прошедшее} = \frac{\hbar k}{m} |A_3|^2$

$D = \frac{|j_{np}|}{|j_n|} = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2}, \text{ durchgeen } R = \frac{|j_o|}{|j_n|} = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2}, \text{ reflektiren}$

$D \approx \frac{16\alpha^2}{(1 + \alpha^2)^2} e^{-2k_2 a} = \frac{16\alpha^2}{(1 + \alpha^2)^2} e^{-\sqrt{8m(U-E)} \frac{a}{\hbar}} \quad \alpha = \frac{k}{k_2} = \sqrt{\frac{E}{U-E}}$

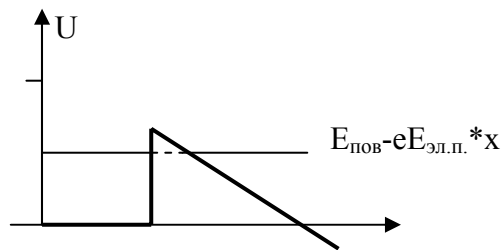
Барьер произвольной формы



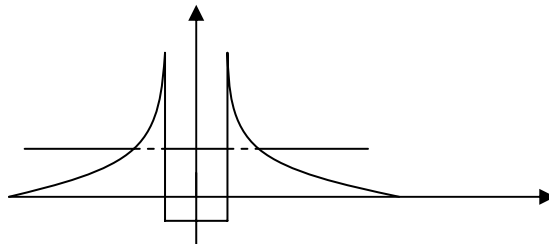
$D = D_0 e^{-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(U(x)-E)} dx}$

Эмиссия

1) Холодная эмиссия электронов



2) α -распад (Г.Гамов 1927)



Для холодной эмиссии

$$D \sim e^{\frac{\sqrt{m}}{e|\bar{E}|\hbar}(U-E)^{3/2}}$$

Тонкий слой $D \sim e^{-\sqrt{8m(U-E)}\frac{a}{\hbar}}$ должно быть $\sqrt{8m(U-E)}\frac{a}{\hbar} \leq 1$ (*)

$m_e = 9 \cdot 10^{-31}$ кг

$$a \leq \frac{\hbar}{\sqrt{8m(U-E)}} \sim \sqrt{U-E} \cdot 10^{-16} \text{ м}$$

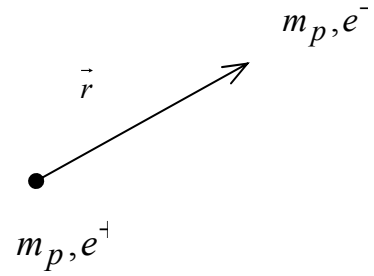
Если $U - E \sim 1 \text{ эВ} = 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}$

То условие (*) выполняется для $a \leq 10^{-10} \text{ м}$

10. Атом водорода

Пренебрегаем:

1. расстоянием между Ц.М. и положением ядра (протона);
2. $(\frac{m_p}{m_e} = 1836)$
3. Движением атома водорода
4. взаимодействием с окружающей средой (Эл. и магн. поля, частицы, химические связи...)
5. собственным моментом импульса
6. $\backslash\backslash\backslash\backslash\backslash\backslash\backslash\backslash$ протона
6. релятивистскими эффектами



$U = -k \frac{e^2}{r}$, $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ сферическая симметрия, поэтому уравнение Шредингера

$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U\psi = E\psi$ имеет смысл записать в сферической системе координат

$$-\frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r}) - \frac{1}{r^2} \cdot \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta}) - \frac{1}{r^2} \cdot \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} - \frac{ke^2}{r} \psi = E \psi$$

Решение характеризуется тремя квантовыми числами: $\psi_{n,l,m}$.

n – характеризует энергию $E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}$, $R = \frac{me^4}{2\hbar^2}$ – постоянная Ритца – Ридберга.

Для каждого n – $n - 1$ решений с $l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$

l – квантовое число орбитального момента импульса (сокращенно – орбитальное квантовое число).

Т.е. для каждого n возможно $\sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n^2$ – состояний,

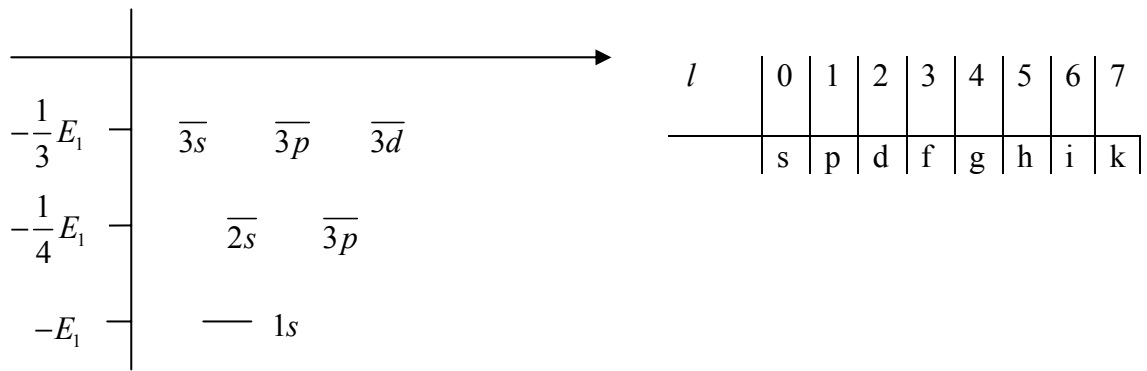
Т.е. кратность вырождения энергетического уровня – n^2 .

При $E > 0$ – дискретность исчезает, e^- может иметь любую энергию (и уже не совершает финитное движение)



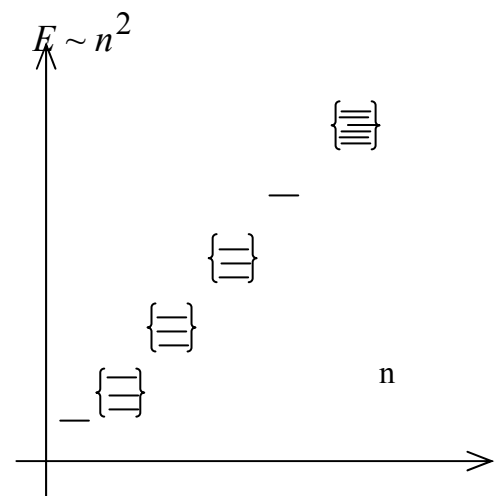
На дом: атом водорода по Н.Бору.

Дополнение: спектроскопическая терминология



Правило отбора $\Delta l = \pm 1$ — при дипольном излучении(фотон уносит \hbar)

| n_x | n_y | n_z | n^2 |
|-------|-------|-------|-----------------------|
| 1 | 1 | 1 | 3 одно состояние |
| 1 | 1 | 2 | Три состояния 6 |
| 1 | 2 | 1 | |
| 2 | 1 | 1 | |
| 1 | 2 | 2 | Три состояния 9 |
| 2 | 1 | 2 | |
| 2 | 2 | 1 | |
| 1 | 1 | 3 | Три состояния 11 |
| 1 | 3 | 1 | |
| 3 | 1 | 1 | |
| 2 | 2 | 2 | 12 одно состояние |
| 1 | 2 | 3 | Шесть состояний 16 |
| 1 | 3 | 2 | |
| 2 | 1 | 3 | |
| 2 | 3 | 1 | |
| 3 | 1 | 2 | |
| 3 | 2 | 1 | |



Пример:

$$\psi_{1,0,0} \sim e^{-\frac{r}{a}},$$

$$\psi_{2,0,0} \sim \left(1 - \frac{r}{2a}\right) e^{-\frac{r}{2a}},$$

$$\psi_{3,0,0} \sim \left(1 - \frac{2r}{3a} + \frac{2r^2}{27a^2}\right) e^{-\frac{r}{3a}}, a = \frac{\hbar^2}{me^2}$$

$$\psi_{2,1,0} \sim r e^{-\frac{r}{2a}} \cdot \cos \theta,$$

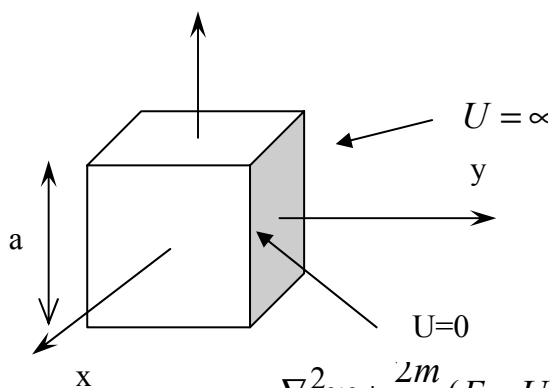
$$\psi_{2,1,1} \sim r e^{-\frac{r}{2a}} \cdot \sin \theta \cdot e^{i\varphi},$$

$$\psi_{2,1,-1} \sim r e^{-\frac{r}{2a}} \cdot \sin \theta \cdot e^{-i\varphi}.$$

8. Вырождение энергетических уровней (на примерах 3D бесконечно глубокой ямы).

$$\psi = C \cdot \sin\left(\frac{\pi n_x}{2a} \cdot x\right) \cdot \sin\left(\frac{\pi n_y}{2a} \cdot y\right) \cdot \sin\left(\frac{\pi n_z}{2a} \cdot z\right)$$

$$n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \dots$$



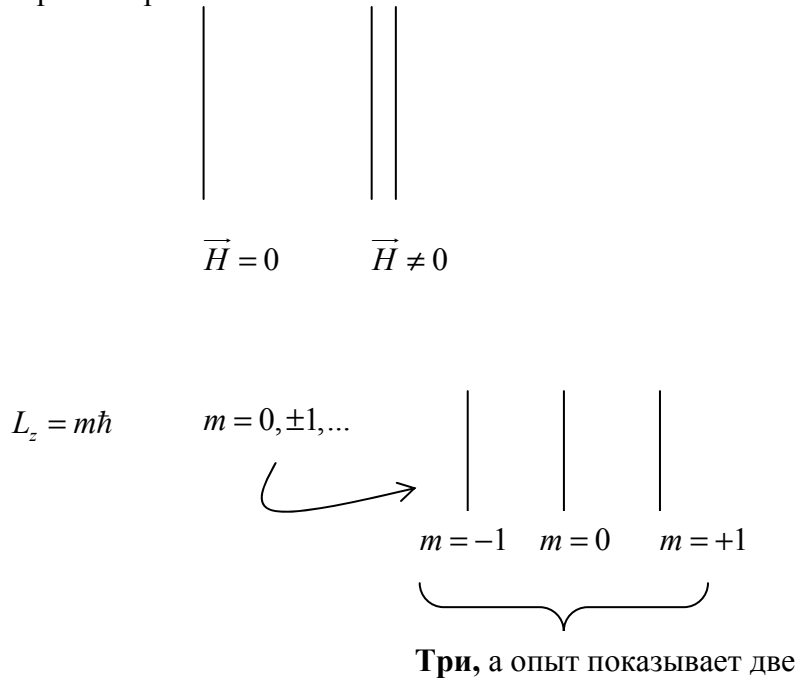
$$n^2 = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2$$

$$\nabla^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \psi = 0 \rightarrow \nabla^2 \psi + \underbrace{\frac{2m}{\hbar^2} E}_{k^2} \psi = 0$$

$$E \sim n^2$$

11. Собственные механический и магнитный моменты электрона — спин

Опыт Штерна - Герлаха

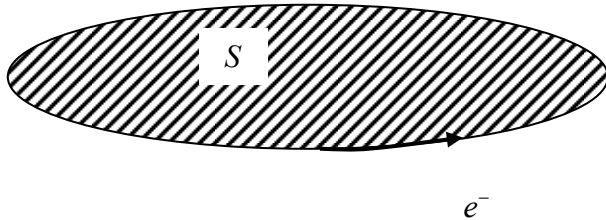


Уленбек и Гаудсмит — спин.

Проекция собственного механического момента электрона S_z на любое направление (в данном случае OZ) измеряется полуцелым числом Планка $S_z = \pm \frac{\hbar}{2}$.

Магнитный момент «классического» e^-

$\mu = \frac{1}{c} JS$, $J = \frac{e}{T}$ — ток, T — период движения.



$$S = \pi r^2, \quad L = mr^2 \frac{d\varphi}{dt} = mv \cdot r\dot{\omega} = mr \cdot v$$

$$T = \frac{2\pi r}{v}, \quad v = \frac{2\pi r}{T}, \quad L = mr \frac{2\pi r}{T} = \frac{2\pi r^2 m}{T} = \frac{2S \cdot m}{T};$$

$$S = \frac{L \cdot T}{2m}, \quad \mu = \frac{eS}{cT} = \frac{1}{2} \frac{e}{cm} L,$$

$$\mu = \frac{1}{2} \frac{e}{cm} L \quad \text{или} \quad \frac{\mu}{L} = \frac{e}{2mc}$$

μ — магнитный момент e кв. мех. Удобно измерять в единицах \hbar : $\vec{\mu} = -\mu_B \frac{\vec{L}}{\hbar}$,

$\frac{\vec{L}}{\hbar}$ — безразмерная величина, знак $-$ в связи с тем, что заряд электрона отрицателен,

μ_B — магнетрон Бора, $\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc}$ (в СИ $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m}$)

μ/L — называется гиромагнитное отношение, $\frac{\mu}{L} = \frac{1}{2} \frac{e}{mc} \frac{L}{L} \cdot g = \frac{e}{2mc} g$,
 g — фактор Ланде

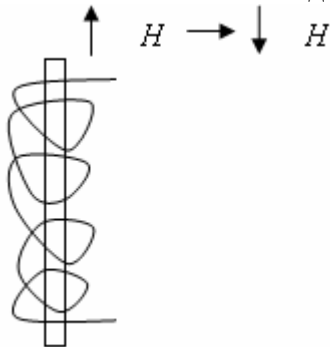
В «классическом» случае $\mu = \frac{1}{2} \frac{e}{mc} L$ и $g = 1$,

В кв. механике для орбитальных моментов $L_z = m\hbar$, $\frac{\mu}{L} = -\mu \frac{1}{\hbar} = -\frac{e}{2mc} \cdot g$, $g = 1$.

Для e^- на $\frac{\mu}{L} \rightarrow \frac{\mu}{S_z} = 2 \cdot \frac{e}{2mc}$, $g = 2$.

S_z — не орбитальное число, а собственный (внутренний) механический момент e^- на, ещё одно квантовое число. Классических аналогов не имеет.

Опыт Эйнштейна – де Гааза



О точности измерения μ_B : $\overline{\mu_B} = \frac{\mu_B}{e\hbar/2mc} = 1$

КЭД дает поправку к $\overline{\mu_B}$

Эксперимент : 1,00115965211(±4)

Теория : 1,00115965246(±20)

Расстояние Лос-Анджелес — Нью-Йорк с точностью до волоса.

12. Принцип Паули

Оператор приставки - $\hat{P} \psi(q_2, q_1) = \hat{P}\psi(q_1, q_2)$

$\psi(1, 2) = \hat{P}\psi(2, 1) = \hat{P}^2\psi(1, 2)$. Т.о. $P^2 = 1, P = \pm 1$

Две возможности для волновой функции двух частиц — быть симметричной (s), или антисимметричной (a). $\psi_s(1, 2) = \psi_s(2, 1), \psi_a(1, 2) = -\psi_a(2, 1)$, под 1 и 2 понимается набор всех координат.

Рассмотрим две невзаимодействующие частицы

$$\hat{H}\psi = (\hat{H}_1 + \hat{H}_2)\psi = E\psi(*)$$

$$\hat{H}_1 = \frac{\hat{p}_1^2}{2m} + U(1), \hat{H}_2 = \frac{\hat{p}_2^2}{2m} + U(2);$$

$$m_1 = m_2$$

Решение (*) $\psi = \varphi_\alpha(1)\varphi_\beta(2)$, причем $\hat{H}_1\varphi_\alpha(1) = E_1\varphi_\alpha(1), \hat{H}_2\varphi_\beta(2) = E_2\varphi_\beta(2), E = E_1 + E_2$

В силу тождественности частиц $\psi = \varphi_\alpha(2)\varphi_\beta(1)$ — тоже решение!

Из этих двух решений можно составить (суперпозиция) симметричную и несимметричную комбинации.

$$\psi_s = \varphi_\alpha(1)\varphi_\beta(2) + \varphi_\alpha(2)\varphi_\beta(1)$$

$$\psi_a = \varphi_\alpha(1)\varphi_\beta(2) - \varphi_\alpha(2)\varphi_\beta(1)$$

Частица подчиняющаяся пр.. Паули описываются антисимметричными волновыми функциями. В этом случае если $1 = 2$, то $\psi_a = 0$ нет такого состояния, что α -я и β -я частица имеют одинаковые координаты (в т.ч. спины, ...).

Поясните: почему в много электронных атомах все e^- ны не “живут” на нижнем энергетическом уровне?

$$N = \sum_i \frac{g_i}{e^{\frac{\varepsilon_i - \mu}{kT}} - 1} \quad U = \sum_i \frac{g_i \varepsilon_i}{e^{\frac{\varepsilon_i - \mu}{kT}} - 1}$$

При низких температурах $T \rightarrow 0 \quad e^{\frac{\varepsilon_i - \mu}{kT}} \gg 1 \quad (\mu < 0)$

$$\text{И } N_i \sim e^{-\frac{|\varepsilon_i - \mu|}{kT}}$$

т.е. число на всех уровнях ε_i меньше, чем на уровне ε_0 . При $T \rightarrow 0 \quad \mu \rightarrow 0!$

Частицы будут накапливаться в макроскопическом количестве, на основном уровне ($\varepsilon = 0$) - это явление называется Бозе-Эйнштейновская конденсация.

Эта конденсация качественно объясняет сверхтекучесть гелия

Все атомы находятся в одинаковом состоянии !

Тема 6. Квантовая статистика и её приложения

6.1. Бозоны и фермионы

Фермионы – частицы, подчиняющиеся принципу Паули

Имеют нецелый спин (электрон, протон, нейтрон...)

Бозоны – не подчиняются принципу Паули, спин целый (фотоны, $He^4...$)

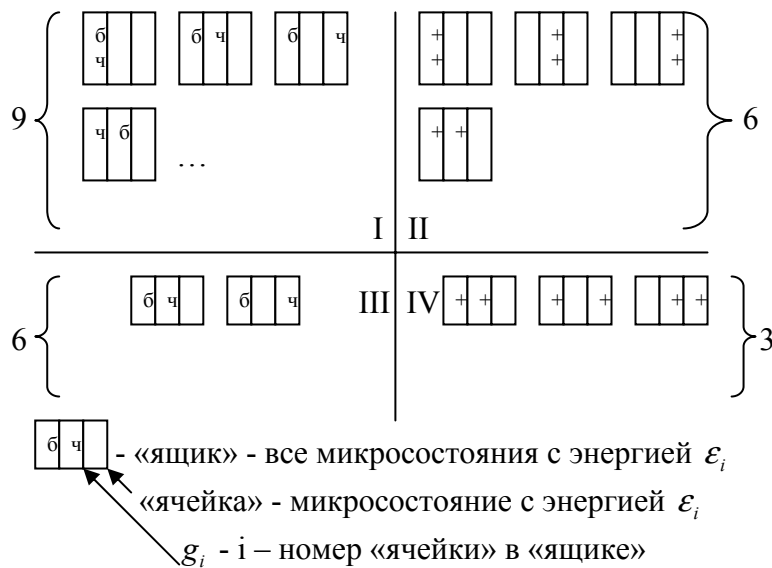
Далее рассматривается идеальный случай – невзаимодействующих частиц

Что мы хотим узнать о системе таких частиц:

1. Вероятность заполнения частиц данного микросостояния с энергией ϵ
2. кол-во частиц с данной энергией ϵ

Два свойства частиц 1) в данном микросостоянии может находиться только одна или много частиц

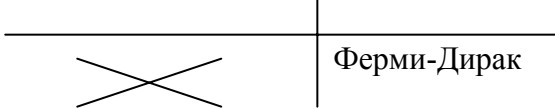
2) частицы различимы или неразличимы (условно белое и чёрное)



Три состояния и две частицы

- I – различимы и нет пр. Паули
- II – неразличимы и нет пр. Паули
- III – различимы и пр. Паули
- IV – неразличимы и пр. Паули

Максвелл-Больцман | Бозе-Эйнштейн

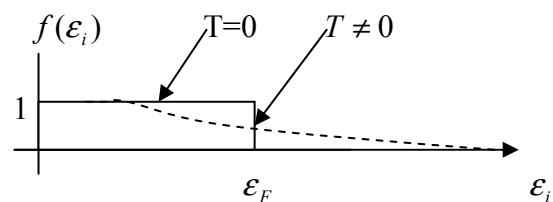
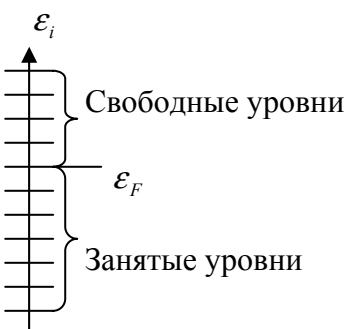


6.2. Распределение Ферми-Дирака и Бозе-Эйнштейна

р. Ф-Д

качественные соображения

- 1) дискретный спектр энергии
- 2) принцип Паули



$$T \rightarrow 0$$

ϵ_F - Уровень Ферми

$$f(\epsilon_i) = \frac{1}{e^{\frac{\epsilon_i - \mu}{kT}} + 1} \text{ распределение Ф-Д}$$

Д.з.: покажите, что при $T \rightarrow 0$ $f(\epsilon_i)$ ступенчатая ф-ция, причём ступеньки находятся при $\epsilon_i = \mu_0 = \mu(T=0)$ при $T=0$ граничная энергия ϵ_F совпадает с граничным значением т.к. химического потенциала μ

Химического потенциал μ : $dQ = TdS = dU + pV - \mu dN$

N_i – наиболее вероятное число частиц с энергией ϵ_i (микросостояние)

$$N_i = g_i f(\epsilon_i) = \frac{g_i}{e^{\frac{\epsilon_i - \mu}{kT}} + 1}$$

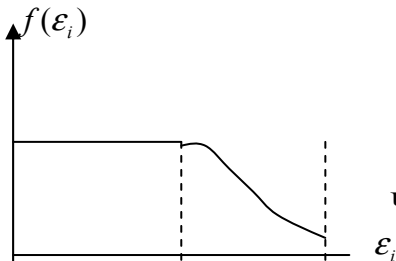
Полное число частиц в системе

$$N = \sum_i \frac{g_i}{e^{\frac{\epsilon_i - \mu}{kT}} + 1}$$

Полная энергия (напомним, частицы невзаимодействующие)

$$U = \sum_i \frac{g_i \epsilon_i}{e^{\frac{\epsilon_i - \mu}{kT}} + 1}$$

Вырожденный ферми-газ (пример: электронный газ в металле)



$$kT \ll kT_F = \mu_0 = \epsilon_{\max} = \epsilon_F$$

T_F - температура вырождения для металла $T_F \approx 10^4 \div 10^5 \text{ K}$

Число занятых уровней для куска металла в $1 \text{ см}^3 \approx 10^{22} \div 10^{23}$

В тепловом движении участвуют только электроны из зоны размытия $\approx kT$ - их очень мало по сравнению с 10^{24}

Распределение Бозе-Эйнштейна

Принцип Паули для бозонов не действует

$$f(\epsilon_i) = \frac{1}{e^{\frac{\epsilon_i - \mu}{kT}} - 1} \text{ - распределение Б-Э}$$

ВВ: хим. Потенциал μ бозе-газа не может быть положительным, т.к. при $\mu > 0$ $f(\epsilon_0 = 0)$ было бы отрицательным

$$N = \sum_i \frac{g_i}{e^{\frac{\epsilon_i - \mu}{kT}} - 1}$$

Примеры

Ф-Д для $T_F \approx 10^4 - 10^5 K$

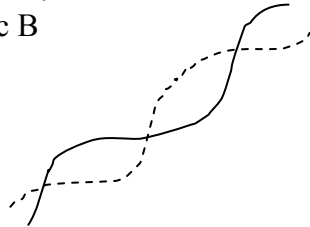
Белые карлики

У Солнца $M = 2 \cdot 10^{33} \text{ г}$ $R = 7 \cdot 10^{10} \text{ см}$ $\rho \approx 1 \text{ г/см}^3$

У белого карлика $\rho \sim 10^4 - 10^7 \text{ г/см}^3$

Пример Сириус В

Бессель 1844



$T_F \approx 3 \cdot 10^9 K$, внутри $T \approx 10^7 K$

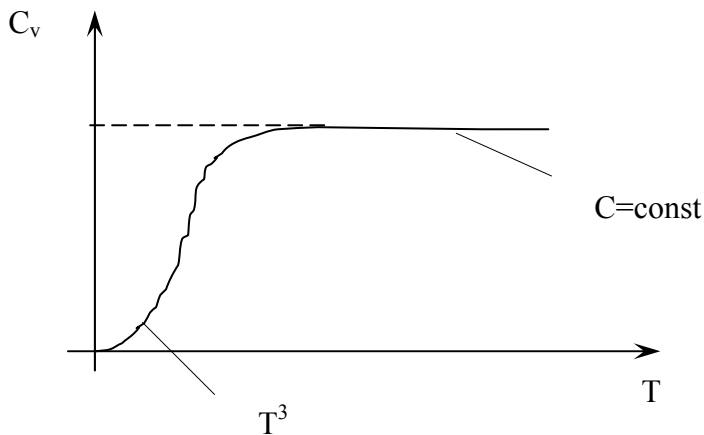
Пульсары – вырожденный нейтронный газ

Б-Э 1) фотона $\mu = 0, \epsilon = \hbar \omega$

$$f(\epsilon) \rightarrow f(\omega) = \frac{1}{e^{\frac{\hbar \omega}{kT}} - 1}, g(\omega) \sim \omega^2$$

2) фононы

Закон Дюлонга и Пти



Элементы физики твёрдого тела

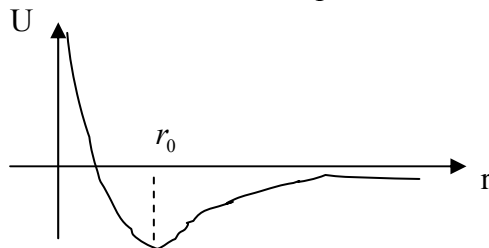
1. Гигантский разброс удельный сопротивлений твёрдых тел

Чистый металл $\rho \sim 10^{-10} \text{ Ом см}$

Хороший диэлектрик $\rho \sim 10^{22} \text{ Ом см}$

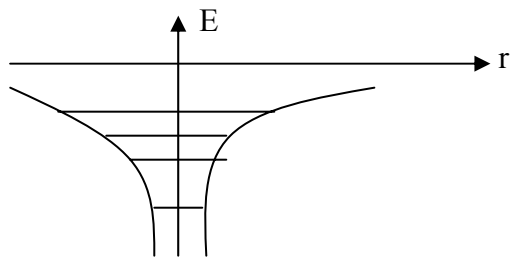
Разброс $\rho \sim 10^{32} \text{ Ом см}$

2. Сближение атомов в кристаллическую решетку

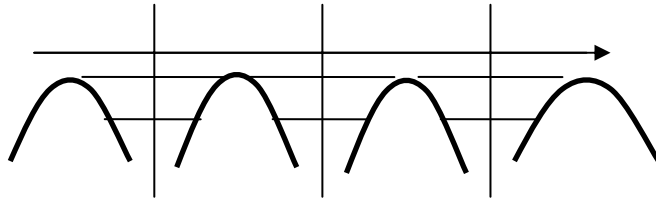


3. Различия в эл. Свойствах т.т. связано с поведением e^- в т.т.

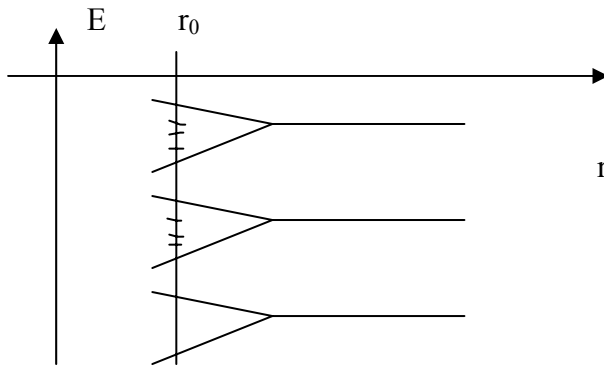
4. Для каждого отдельного атома (далекого от других)



5. При сближении атомов волновые ф-ции перекрываются

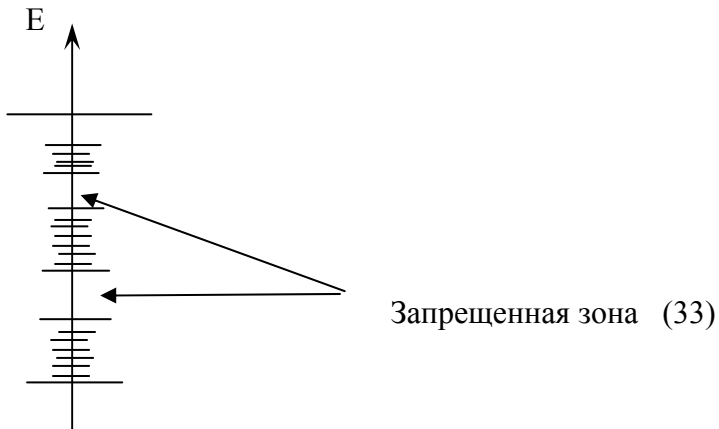


- уровень перекрывающийся в зону



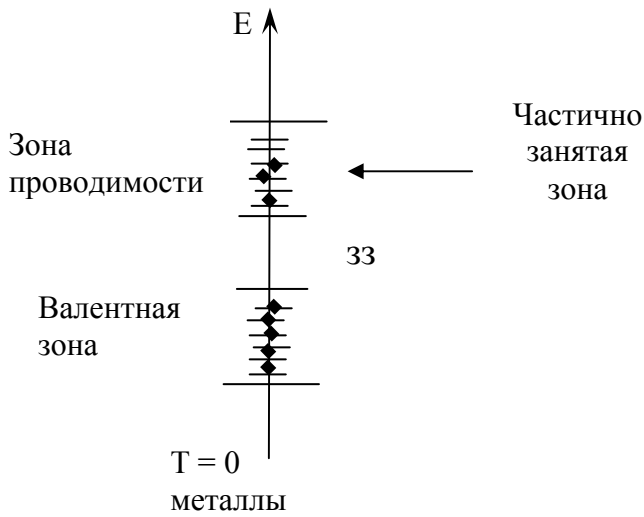
r_0 -расстояние между атомами в решетке

6. Зонная структура



7. Диэлектрики, полупроводники, металлы

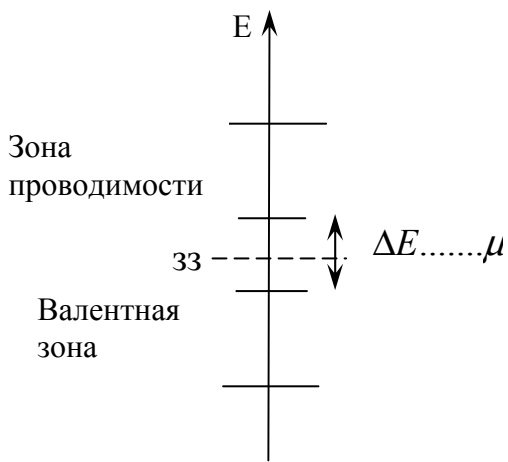




8. Полупроводник

$$E - \mu \gg kT$$

$$n_i \sim f(\epsilon_i) \sim \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{kT}} + 1} \approx e^{-\frac{E-\mu}{kT}}$$



$$E - \mu \approx \frac{\Delta E}{2}$$

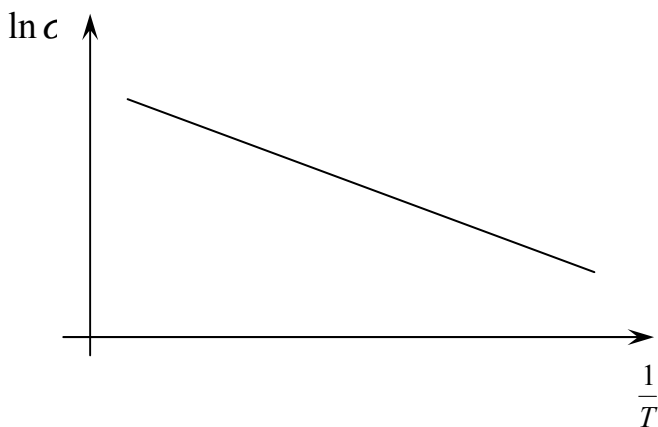
$$n_i \sim e^{-\frac{E-\mu}{kT}}$$

– количество электронов в зоне проводимости

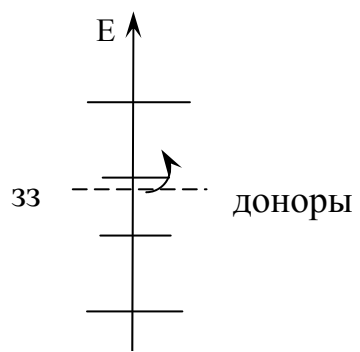
При $E - \mu \gg kT$ – диэлектрик

У п/п $\Delta E : 2\Delta\epsilon$ (бывают разные).

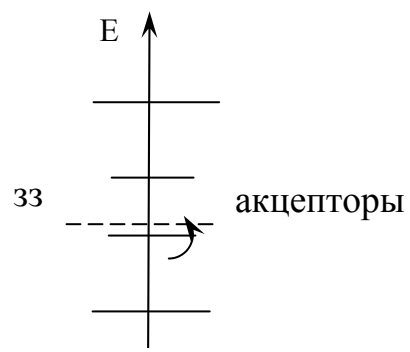
$$c \sim n \sim e^{-\frac{E-\mu}{kT}} \quad \ln \sigma = B - A \frac{1}{T}$$



9.



N – тип
Электронная проводимость



P – тип
Дырочная проводимость

