

Билет 18

1. Основные постулаты квантовой механики.

Представление физических величин операторами.

Собственные функции и собственные значения операторов, их связь с результатами измерений.

Состояние частицы в квантовой механике описывается заданием волновой функции $\psi(x, y, z, t)$, являющейся функцией пространственных координат и времени. **Второй постулат квантовой механики:** каждой физической величине

соответствует определенный оператор этой физической величины. **1. Оператор координаты** – умножение на координату. **2. Оператор импульса** –

$$\hat{p} = -i\hbar \nabla$$

3. Оператор момента импульса –

$\mathbf{p} = -i\hbar \nabla$. 3. Оператор момента импульса -

$$\mathbf{L}_x = y p_z - z p_y, \quad \mathbf{L}_y = z p_x - x p_z, \quad \mathbf{L}_z = x p_y - y p_x. \quad \text{Для}$$

сферических координат:

$$\mathbf{L}_x = -i\hbar (\sin\varphi (\partial/\partial\theta) + \operatorname{ctg}\theta \cos\varphi (\partial/\partial\varphi)),$$

$$\mathbf{L}_y = -i\hbar (\cos\varphi (\partial/\partial\theta) - \operatorname{ctg}\theta \sin\varphi (\partial/\partial\varphi)),$$

$$\mathbf{L}_z = -i\hbar (\partial/\partial\varphi).$$

4. Операторы энергий. $E_k = p^2/2m_0 = -\hbar^2/2m_0 \Delta$. $U\psi = U\psi$.

Гамильтониан

$$\mathbf{H} = E_k + U = -\hbar^2/2m_0 \Delta + U.$$

Если при действии оператора на некоторую функцию получается та же

самая функция, умноженная на число, то есть,

если $\Phi\psi = f\psi$, то такую функцию

если $\Phi\psi=f\psi$, то такую функцию называют **собственной функцией** оператора Φ , а число f его **собственным значением**.

1. Спектр непрерывный. 2.

$-i\hbar\nabla\psi=p_x\psi\Rightarrow\psi=C\exp(ip_x x/\hbar)\Rightarrow$ спектр непрерывный. 3.

$i\hbar(\partial\psi/\partial\varphi)=L_z\psi\Rightarrow\psi=C\exp(iL_z\varphi/\hbar)$. Учитывая,
 $\psi(\varphi+2\pi)=\psi(\varphi)\Rightarrow\exp(iL_z(\varphi+2\pi)/\hbar)=\exp(iL_z\varphi/\hbar)\Rightarrow\exp(iL_z2\pi/\hbar)=1$

$\Rightarrow L_z2\pi/\hbar=2\pi m$, где $m=0, \pm 1, \pm 2\dots\Rightarrow L_z=m\hbar$,
соответствует собственным функциям

соответствует собственным функциям

$$\Psi_l(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{il\varphi}$$

$$L^2 = \hbar^2 l(l+1), \quad l=0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Задачи о нахождении спектра собственных значений оператора полной энергии \mathbf{H} связаны с заданием конкретного вида потенциального силового поля, в котором движется частица.

Формула для расчета среднего значения физической величины f в квантовом состоянии системы, описываемом волновой функцией ψ :

$$\langle f \rangle = \int_V \psi^* f \psi dV$$

Часто эту формулу называют **4-м**

постулатом квантовой механики.

2. Электрон в периодическом поле кристалла.

Образование энергетических зон. Энергетический спектр электронов в модели Кронинга-Пенни.

В основе зонной теории лежит так называемое адиабатическое приближение. Квантово-механическая система разделяется на тяжелые и легкие частицы- ядра и электроны. Поскольку массы и скорости этих частиц значительно различаются, можно считать, что движение электронов происходит в поле неподвижных ядер, а медленно движущиеся ядра находятся в усредненном поле всех электронов. Принимая, что ядра в узлах кристаллической решетки находятся неподвижны, движение электрона рассматривается в постоянном периодическом поле ядер.

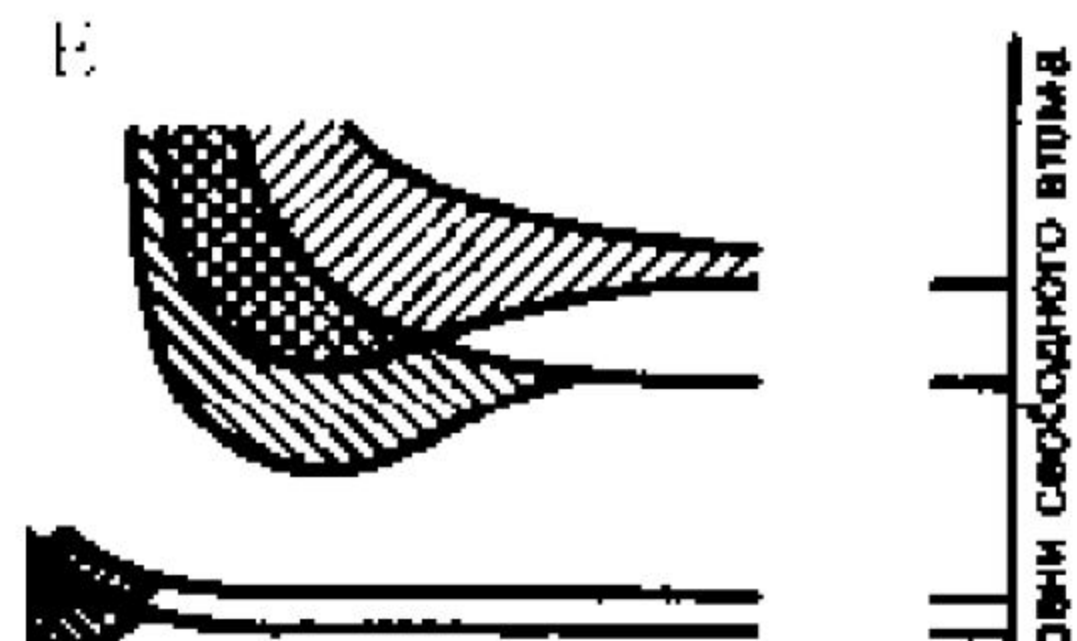
периодическом поле ядер.
Далее используем приближение самосогласованного поля. Взаимодействие данного электрона со всеми другими заменяется действием на него стационарного эл. поля, обладающего периодичностью кристалл. решетки. Это поле создается усредненным в пространстве зарядом всех других электронов и всех ядер. Пока атомы изолированы, т.е. находятся друг от друга на макроскопических расстояниях, они имеют совпадающие схемы энергетических уровней. (см. рис). По мере сжатия нашей модели до кристалл. решетки, т.е. когда расстояния между атомами станут равными межатомным, взаимодействие между атомами приводит к тому,

взаимодействие между атомами приводит к тому, что энергетические уровни атомов смещаются, расщепляются и расширяются, образуется **зонный энергетический спектр**.

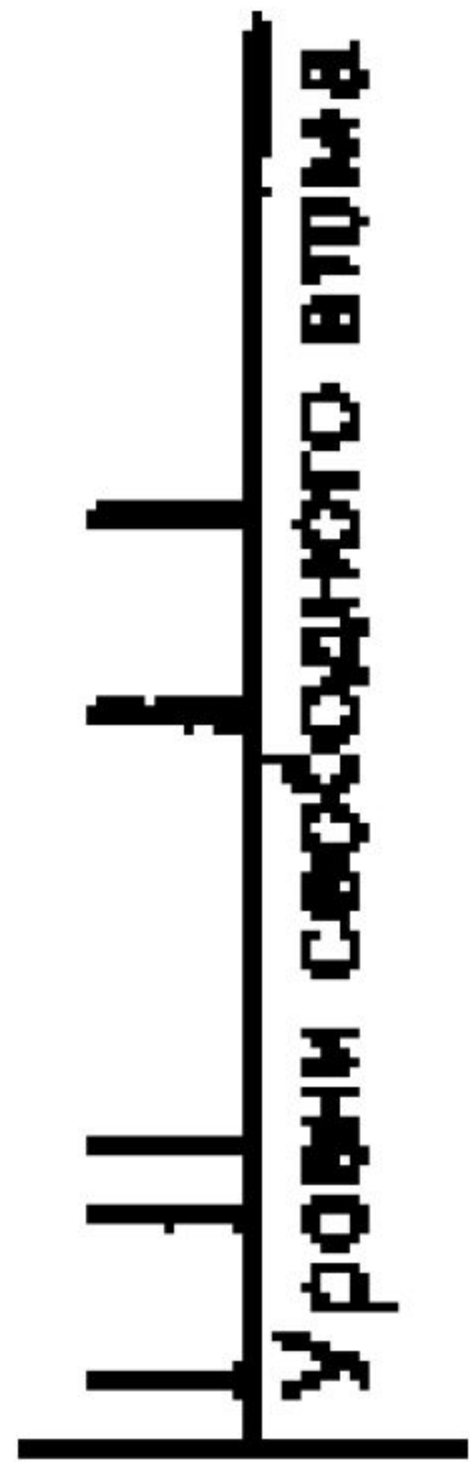
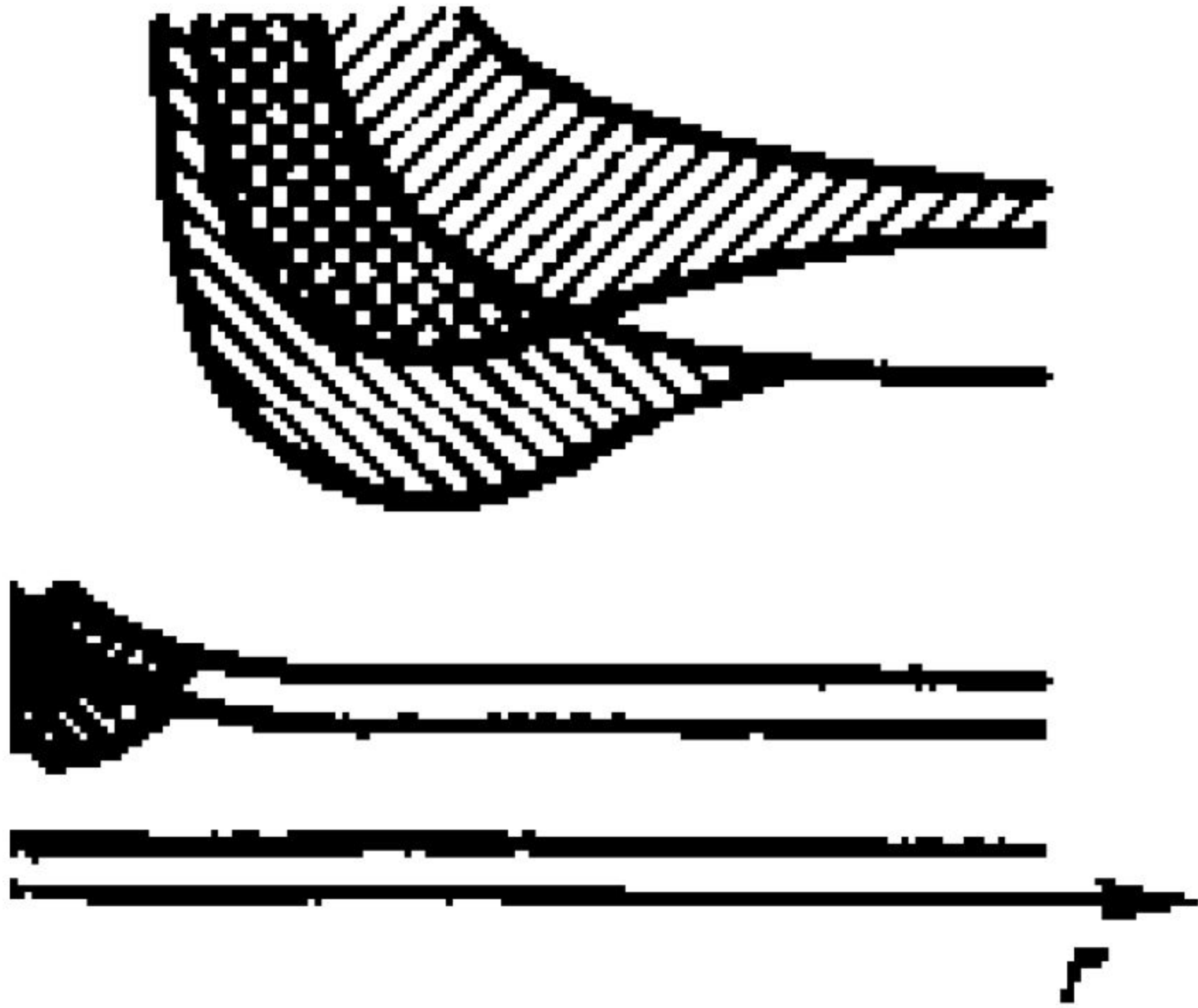
Образование зонного энергетического спектра в кристалле является квантово-механическим эффектом и вытекает из соотношения неопределенностей. В кристалле валентные электроны атомов, связанные слабее с ядрами, чем внутренние электроны, могут переходить от атома к атому сквозь потенциальные барьеры, разделяющие атомы, т.е. перемещаться без изменения потенциальной энергии (туннельный эффект).

Энергия внешних может принимать значения в пределах закрашенных областей (см.рис),

пределах закрашенных областей (см.рис), называемых разрешенными энергетическими зонами. Разрешенные энергетические зоны разделяются зонами запрещенных значений энергии, называемые запрещенными энергетическими зонами.



13



Задание 18

Вспомогательное распределение свободных электронов в металле по энергии, найдите отношение средней кинетической энергии свободных электронов в металле при $T=0$ к их максимальной энергии.

Дано:
 $T=0$
 $\frac{\langle E \rangle}{E_{max}}$

Решение:

$$dn = \frac{\sqrt{2} m^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E} dE$$

Dans:

$$T=0$$

$$\frac{\langle E \rangle}{E_{\max}} = ?$$

Pour:

$$dn = \frac{\sqrt{2} m^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E} dE$$

$$n = \frac{\sqrt{2} m^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \cdot \frac{2}{3} E^{3/2}$$

$$\langle E \rangle = \frac{1}{n} \int E dn = \frac{3}{5} E_F$$

$$E_{\max} = E_F \Rightarrow \frac{\langle E \rangle}{E_{\max}} = \frac{3}{5}$$