

# Южно-Уральский государственный гуманитарно-педагогический университет

# Южно-Уральский научный центр Российской академии образования (РАО)

Л. М. Свирская

# ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА (КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА. СТАТИСТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА И ТЕРМОДИНАМИКА)

# Учебно-методическое пособие для студентов по подготовке к курсовому экзамену

## Челябинск

2025

УДК 530.1(021)

ББК 22.31 я 73

C24

Рецензенты:

канд. физ.-мат. наук, доцент Н. А. Векессер

канд. физ.-мат. наук, доцент А. С. Зарезина

**Свирская, Людмила Моисеевна**

C24     Теоретическая физика (Квантовая механика. Статистическая физика и термодинамика) : учебно-методическое пособие по подготовке к курсовому экзамену / Л. М. Свирская ; Южно-Уральский государственный гуманитарно-педагогический университет. – [Челябинск] : Южно-Уральский научный центр РАО, 2025. – 150 с. : ил.

ISBN 978-5-907821-73-6

Пособие представляет методические материалы для подготовки к курсовому экзамену по дисциплине Б1.0.07.15 «Теоретическая физика» (ТФ), которая относится к обязательным дисциплинам блока 1 «Дисциплины (модули)» (модуль «Предметно-методический» профиля «Физика») основной образовательной программы по профилям «Физика. Математика» и «Физика. Дополнительное образование (информатика и робототехника)» в соответствии с Федеральным государственным образовательным стандартом высшего профессионального образования (ФГОС ВО) по направлению 44.03.05 Педагогическое образование (с двумя профилями подготовки) (бакалавриат). Оно содержит вопросы по ведущим разделам курса ТФ – «Квантовая механика», «Статистическая физика и термодинамика», выносимые на экзамен. Даётся подробное решение основных задач по указанным разделам; формулируются методические рекомендации по подготовке ответов на вопросы, входящие в экзаменационные билеты. Пособие адресовано преподавателям вузов и студентам педагогических вузов профильной направленности «физика» и соответствует требованиям ФГОС ВО 3++.

УДК 530.1(021)

ББК 22.31 я 73

ISBN 978-5-907821-73-6

© Свирская Л. М., 2025

© Оформление. Южно-Уральский  
научный центр РАО, 2025

## Содержание

Пояснительная записка .....	5
<hr/>	
1 Основные требования к изучению разделов «Квантовая механика», «Статистическая физика и термодинамика» курса теоретической физики .....	10
<hr/>	
2 Содержание разделов «Квантовая механика», «Статистическая физика и термодинамика». Вопросы к курсовому экзамену по дисциплине «Теоретическая физика» .....	19
<hr/>	
3 Примеры задач, включаемых в курсовой экзамен по дисциплине «Теоретическая физика» .....	25
<hr/>	
4 Примеры решения задач по разделу «Квантовая механика» .....	50
<hr/>	
5 Примеры решения задач по разделу «Статистическая физика и термодинамика» .....	82
<hr/>	
6 Структура билета курсового экзамена и требования к оцениванию ответов студентов .....	103
<hr/>	

Заключение .....	109
.....	.....
Список литературы .....	111
.....	.....
Приложение А «Фундаментальные физические константы, используемые в квантовой механике и статистической термодинамике» (справочное) .....	114
.....	.....
Приложение Б «Некоторые определённые интегралы» (справочное) .....	116
.....	.....
Приложение В «Дельта-функция Дирака» (справочное) .....	121
.....	.....
Приложение Г «Некоторые специальные функции» (справочное) .....	123
.....	.....
Приложение Д «Основные формулы» (справочное) ....	126
.....	.....
Приложение Е «Образец экзаменационного билета» (справочное) .....	149
.....	.....

## **Пояснительная записка**

«Нерелятивистская квантовая механика» и «Статистическая физика и термодинамика» относятся к дисциплинам предметной подготовки учителя физики, которые играют решающую роль в формировании теоретического базиса обучающихся, позволяющего понимать картину современной физики.

Особенно большое значение имеет квантовая механика, которая отметила уже своё 100-летие. Неслучайно 2025 год объявлен по решению ООН Международным годом квантовой науки и технологий. Данная всемирная инициатива обусловлена признанием выдающегося вклада квантовой механики и её технологических приложений в развитие науки, образования и культуры. Будущее человеческой цивилизации во многом будет определяться дальнейшими успехами реализации квантовых технологий.

Квантовой механике принадлежит ведущая роль в формировании современной физической картины мира, в обеспечении базовой профессиональной подготовки в области физики и создании прочного теоретического фундамента для квалифицированного преподавания физики в различных образовательных учреждениях. Курс квантовой механики позволит не только понимать широкий круг известных сегодня квантовых явлений, но и станет основой, которая позволит учителю в дальнейшем ориентироваться в море многочисленных последующих открытий квантового мира. Будущий учитель должен ясно понимать, что тем, кто сегодня осваивает физику на школьной скамье, в дальнейшем предстоит реализовать многие интересные проекты,

связанные с квантовыми технологиями. Это обстоятельство предъявляет соответствующие требования к подготовке учителя физики.

Квантовая механика опирается на ряд постулатов и фундаментальных принципов. Постулаты нерелятивистской квантовой механики:

1. Состояние микрочастицы (или квантовой системы) описывается с помощью волновой функции  $\Psi$  (или вектора состояния  $|\Psi\rangle$  в гильбертовом пространстве), которая удовлетворяет трём стандартным условиям: она должна быть конечной, однозначной и непрерывной. Квадрат модуля  $|\Psi|^2$  определяет вероятность обнаружить частицу в данной точке пространства.

2. Каждой динамической переменной сопоставляется линейный самосопряжённый оператор.

3. Вероятность получить собственное значение  $\ell_n$  при измерении в состоянии  $\Psi$  равна  $W_n = |c_n|^2$ , где  $c_n$  – коэффициенты в разложении  $\Psi$  по ортонормированному базису

$$\Psi = \sum_n c_n \Psi_n, \quad c_n = \langle \Psi_n | \Psi \rangle.$$

Определением среднего значения механической величины является

$$\bar{L} = \int_V \Psi^* \hat{L} \Psi dV = \langle \Psi | \hat{L} | \Psi \rangle.$$

4. Основным уравнением нерелятивистской квантовой механики является уравнение Шрёдингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi,$$

где гамильтониан (оператор энергии) имеет вид

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U.$$

Стационарное уравнение Шрёдингера имеет следующий вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + U\Psi = E\Psi.$$

К числу фундаментальных принципов квантовой механики относятся:

1. Принцип суперпозиции состояний.
2. Принцип неопределённостей Гейзенберга.
3. Принцип дополнительности.
4. Принцип соотвествия.
5. Принцип неразличимости одинаковых микрочастиц.
6. Принцип Паули.
7. Принцип неклонируемости квантовых состояний (теорема о запрете клонирования).

Задачи одномерного движения и движения микрочастицы в поле центральных сил требуют умения решать дифференциальные уравнения второго порядка в частных производных и знания специальных функций, которые обсуждаются в курсе «Методы математической физики». При наличии граничных условий рассматриваемая задача сводится к задаче Штурма – Лиувилля – краевой задаче для обыкновенного дифференциального уравнения второго порядка, в которой ищутся собственные значения и соответствующие им собственные функции, удовлетворяющие заданным граничным условиям. Она является частным случаем задачи на собственные значения для операторов.

В описании явлений микромира, как правило, отсутствует наглядность, и разобраться в физике атомных масштабов помогает математический формализм. Однако следует понимать, что квантовая механика не сводится лишь к математическому аппарату, и, проведя решение задачи, необходимо выяснить физический смысл полученных результатов.

Курс термодинамики и статистической физики построен на основе сочетания феноменологического (макроскопического) и статистического (микроскопического) описания закономерностей теплового движения структурных видов материи, возникающих в системах, состоящих из большого числа механически движущихся частиц. В основе термодинамики лежат фундаментальные законы (4 начала термодинамики), являющиеся обобщением опытных фактов:

1. Нулевое начало: температура как функция состояния.
2. Первое начало: закон сохранения и превращения энергии для тепловых явлений.
3. Второе начало: закон об энтропии (необратимость макроскопических процессов в природе).
4. Третье начало: тепловая теорема Нернста (1906 г.); поведение энтропии при приближении к абсолютному нулю. Важнейшее следствие: недостижимость абсолютного нуля температуры.

Статистическая физика позволяет дать молекулярную интерпретацию термодинамических понятий и законов, и поэтому позволяет получить более глубокие знания о многочастичных системах.

Пособие включает перечень теоретических вопросов и типовые задачи по основным разделам нерелятивистской квантовой механики и статистической термодинамики. Даётся подробный

разбор 20 задач, открывающий путь к самостоятельному решению большого круга задач, отражающих прикладные аспекты квантовой механики и статистической термодинамики.

В списке рекомендуемой литературы приводятся основные учебные пособия по квантовой механике (№1–11) и статистической термодинамике (№ 12–19).

# **1 Основные требования к изучению разделов «Квантовая механика», «Статистическая физика и термодинамика» курса теоретической физики**

## **1.1 Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы**

Дисциплина Б1.0.07.15 «Теоретическая физика» (ТФ) относится к обязательным дисциплинам блока 1 «Дисциплины (модули)» (модуль «Предметно-методический» профиля «Физика») основной профессиональной образовательной программы по профилям «Физика. Математика» и «Физика. Дополнительное образование (информатика и робототехника)» в соответствии с Федеральным государственным образовательным стандартом высшего профессионального образования (ФГОС ВО) по направлению 44.03.05 Педагогическое образование (с двумя профилями подготовки) (бакалавриат). Общая трудоемкость дисциплины ТФ составляет 19 зачетных единиц, 684 часа. Осваивается на 3 – 5 курсах, 5, 6, 7, 8, 9, 10 семестры.

Изучение дисциплины «Теоретическая физика» основано на знаниях, умениях и навыках, полученных при изучении обучающимися следующих дисциплин: «Математический анализ», «Алгебра», «Геометрия», «Общая и экспериментальная физика», «Методы математической физики».

Курс ТФ включает 7 разделов: классическая механика, классическая электродинамика, специальная теория относительности, квантовая механика, статистическая физика и термодинамика, физика твёрдого тела, физика атомного ядра

и элементарных частиц. Каждый раздел дисциплины «Теоретическая физика» формирует знания, умения и компетенции, необходимые для освоения последующих разделов данного курса, а также следующих дисциплин: «Экспериментальная физика», «История физики», «Методика обучения физике», «Астрономия», «Электрорадиотехника» и др. Курс ТФ также является основой для последующего прохождения учебных и производственных практик и для подготовки к государственной итоговой аттестации.

## **1.2 Цель изучения дисциплины**

Целью дисциплины является формирование базовой профессиональной подготовки в области физики, формирование целостных представлений о современной физической картине мира и компетенций в соответствии с требованиями ФГОС ВО, овладение основами физики как фундаментальной науки.

Основные задачи дисциплины «Теоретическая физика»:

- формирование основных понятий и представлений теоретической физики как фундамента современной науки;
- ознакомление студентов с основными методами ТФ и её практическими приложениями;
- формирование знаний, позволяющих ориентироваться в потоке научной и технической информации и понимать границы применимости физических понятий, законов, теорий;
- ознакомление студентов с наиболее значимыми теоретическими достижениями, заложившими основы ТФ и поднявшими физику на новый уровень развития;
- формирование научного мировоззрения и современного физического мышления;

- развитие навыков использования физических моделей для объяснения природных явлений;
- подготовка к ведению исследовательской деятельности при выполнении выпускных квалификационных работ;
- создание прочного теоретического фундамента для квалифицированного преподавания физики в учебных заведениях разного типа (школах, гимназиях, лицеях);
- формирование у будущих учителей представления о теоретической физике как о как важнейшей составной части общечеловеческой культуры;
- подготовка студентов для продолжения образования в магистратуре.

### **1.3 Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)**

Достижение цели освоения дисциплины (модуля) обеспечивается через формирование следующих компетенций:  
УК-1, ПК-1.

Таблица 1

Код и наименование компетенции по ФГОС	Код и наименование индикатора достижения компетенции
УК-1 способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач	<p>УК-1.1 Демонстрирует знание особенностей системного и критического мышления, аргументированно формирует собственное суждение и оценку информации, принимает обоснованное решение.</p> <p>УК-1.2 Применяет логические формы и процедуры, способен к рефлексии по поводу собственной и чужой мыслительной деятельности.</p> <p>УК-1.3 Анализирует источники информации с целью выявления их противоречий и поиска достоверных суждений.</p>
ПК-1 способен осваивать и использовать теоретические знания и практические умения и навыки в предметной области при решении профессиональных задач	<p>ПК-1.1 Знает структуру, состав и дидактические единицы предметной области (преподаваемого предмета).</p> <p>ПК-1.2 Умеет осуществлять отбор учебного содержания для его реализации в различных формах обучения в соответствии с требованиями ФГОС ОО.</p> <p>ПК-1.3 Демонстрирует умение разрабатывать различные формы учебных занятий, применять методы, приемы и технологии обучения, в том числе информационные.</p>

Таблица 2

Код и наимено- вание индика- тора достиже- ния компетен- ции	Образовательные результаты по дисциплине		
	знать	уметь	владеть
1	2	3	4
УК-1. Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач	фундаментальные основы теоретической физики, её основные понятия, законы и модели; основные этапы развития теоретической физики, её актуальные проблемы; основные методы ТФ и её практические приложения;	излагать и критически анализировать базовую информацию по теоретической физике; пользоваться теоретическими основами, понятиями, законами и моделями теоретической физики; применять математические методы теоретической физики для решения	навыками грамотного использования языка теоретической физики; способами совершенствования профессиональных знаний и умений путём использования информационной среды; навыками устанавливать содержательные, методологические и

*Продолжение таблицы 2*

1	2	3	4
	границы применимости физических понятий, законов, теорий	конкретных задач; анализировать основные проблемы теоретическая физики и формулировать собственную позицию по спорным вопросам; представлять физическую информации различными способами (в вербальной, знаковой, аналитической, математической, графической, алгоритмической формах)	мировоззренческие связи теоретической физики со смежными научными областями; культурой научного мышления, позволяющей отсеивать и опровергать псевдонаучные теории
ПК-1. Способен осваивать и использовать теоретические	структуру, состав и дидактические единицы теоретической физики как фун-	использовать необходимый математический аппарат для получения кон-	способами анализа научных идей, теорий и результатов реше-

*Продолжение таблицы 2*

1	2	3	4
знания и практические умения и навыки в предметной области при решении профессиональных задач	даментальной области современной науки; основы теоретической физики, позволяющие в последующей профессиональной деятельности выстраивать учебный процесс с опорой на фундаментальные знания из совокупности всех разделов курса ТФ	крайних теоретических результатов; давать правильную физическую интерпретацию получаемых решений; использовать знания курса ТФ для анализа содержания школьных учебников физики, выявления в них некорректных утверждений и теоретических положений, требующих квалифицированного разъяснения	ния задач в рамках используемых моделей, демонстрирующих понимание основ теоретической физики; навыками анализа результатов компьютерных экспериментов, иллюстрирующих эффекты ТФ

В результате освоения дисциплины студент:

1. Должен знать:

- основные теоретические положения классической механики, классической электродинамики, квантовой механики, специальной теории относительности, статистической физики и термодинамики, физики твёрдого тела, физики атомного ядра и элементарных частиц;
- основные модели физических явлений, формулируемые в рамках перечисленных разделов курса ТФ;
- основные физические законы и теории соответствующих разделов ТФ, а также границы их применимости;
- физические величины, используемые в указанных разделах физики;
- математический аппарат, используемый для создания физических моделей и предсказания результатов экспериментов;
- основы теоретической физики, позволяющие понимать процессы развития фундаментальных областей физики и вовлечь в этот процесс своих учеников в дальнейшей профессиональной деятельности.

2. Должен уметь:

- использовать фундаментальные знания курса ТФ для объяснения широкого круга явлений и эффектов, наблюдаемых в природе, а также в условиях лабораторного и компьютерного эксперимента;
- решать основные задачи, соответствующие программе курса;
- анализировать физический смысл получаемых результатов;

– применять принцип соответствия при анализе взаимосвязи между предшествующей и последующей физической теорией.

3. Должен владеть:

- фундаментальными понятиями, законами и теориями современной и классической физики;
- навыками анализа физического смысла получаемых теоретических результатов, мысленных и компьютерных экспериментов;
- основными методами постановки, исследования и решения задач.

4. Должен демонстрировать способность и готовность

- к пониманию основ теоретической физики;
- к применению результатов освоения дисциплины в профессиональной деятельности;
- к пониманию места теоретической физики в системе общечеловеческой культуры.

## **2 Содержание разделов «Квантовая механика», «Статистическая физика и термодинамика». Вопросы к курсовому экзамену по дисциплине «Теоретическая физика»**

Содержание дисциплин «Квантовая механика», «Статистическая физика и термодинамика» соответствует программе «Ядро высшего педагогического образования» и включает следующие разделы: «Основные положения и математический аппарат квантовой теории»; «Динамические уравнения и законы сохранения»; «Одномерное движение»; «Квантовая частица в центрально-симметричном поле»; «Теория возмущений»; «Элементы теории излучения»; «Спин электрона»; «Системы тождественных частиц»; «Многоэлектронные атомы и молекулы»; «Квантование электромагнитного поля»; «Основные положения статистической физики»; «Статистическая термодинамика»; «Статистическое распределение для системы в термостате и основные применения распределения Гиббса»; «Квантовые статистики идеального газа»; «Равновесие фаз и фазовые переходы»; «Элементы теории флуктуаций»; «Основы теории неравновесных процессов».

В соответствии с этими положениями формулируются вопросы, выносимые на курсовой экзамен по теоретической физике.

### **Раздел 1. Квантовая механика**

1.1. Принцип суперпозиции состояний в квантовой механике. Вектор состояния. Динамические переменные квантовой механики и линейные самосопряжённые операторы.

1.2. Измерения в квантовой механике. Редукция фон Неймана. Неравенство Гейзенberга. Принцип дополнительности.

1.3. Запутанные квантовые состояния. Квантовая телепортация.

1.4. Уравнение Шрёдингера. Стационарные состояния, их свойства.

1.5. Плотность потока вероятности. Уравнение непрерывности в квантовой механике.

1.6. Обобщение уравнения Гамильтона–Якоби в квантовой механике. Предельный переход к классической механике.

1.7. Общие свойства одномерного движения микрочастицы. Задача о частице в потенциальной яме.

1.8. Квантовый линейный гармонический осциллятор (ЛГО). Энергетический спектр и распределение вероятностей нахождения ЛГО. Правила отбора.

1.9. Движение микрочастицы в поле потенциальной ступеньки. Надбарьерное рассеяние.

1.10. Прохождение микрочастицы через потенциальный барьер. Туннельный эффект и его практические приложения.

1.11. Общие свойства движения микрочастицы в центрально-симметричном поле, законы сохранения.

1.12. Собственные значения и собственные функции оператора орбитального момента. Пространственное квантование. Угловое распределение плотности вероятности.

1.13. Радиальная плотность вероятности и энергетический спектр водородоподобного атома. Стационарные состояния атома водорода и их описание с помощью квантовых чисел.

1.14. Стационарная теория возмущений в отсутствие вырождения. Физический смысл поправок первого и второго порядка к невозмущённым уровням энергии.

1.15. Стационарная теория возмущений при наличии вырождения.

1.16. Правила отбора для орбитального и магнитного квантовых чисел.

1.17. Основы статистической теории излучения Эйнштейна. Спонтанное и индуцированное излучение. Коэффициенты Эйнштейна.

1.18. Соотношение неопределённостей для энергии и времени. Объяснение естественной ширины энергетических уровней в квантовой теории излучения.

1.19. Операторы спина. Матрицы Паули.

1.20. Спин-орбитальное взаимодействие. Тонкая структура спектра водородоподобного атома.

1.21. Нормальный эффект Зеемана.

1.22. Аномальный (сложный) эффект Зеемана.

1.23. Принцип неразличимости одинаковых микрочастиц. Связь спина со статистикой. Бозоны и фермионы.

1.24. Принцип Паули.

1.25. Атом гелия. Синглетные и триплетные состояния атома гелия. Обменная энергия. Орто- и парагелий.

1.26. Молекула водорода. Природа гомеополярной химической связи.

1.27. Периодическая система химических элементов Д.И. Менделеева.

1.28. Спин и валентность.

1.29. Многоэлектронные атомы. Правила Хунда.

1.30. Квантование энергии свободного электромагнитного поля.

## **Раздел 2. Статистическая физика и термодинамика**

- 2.1. Макро- и микросостояния макроскопической системы. Функция статистического распределения в фазовом пространстве. Метод ансамблей Гиббса. Термодинамические величины как средние по ансамблю.
- 2.2. Статистическая природа необратимости макроскопических процессов. Статистическое равновесие. Теорема об относительной флуктуации аддитивной функции состояния.
- 2.3. Равновесные статистические распределения Гиббса (микроканоническое, каноническое, большое каноническое).
- 2.4. Статистическая сумма (статистический интеграл) и её связь с термодинамическими параметрами (свободная энергия, энтропия, давление, средняя энергия).
- 2.5. Статистическое определение энтропии. Энтропия и информация.
- 2.6. Распределение Максвелла – Больцмана (вывод на основе канонического распределения Гиббса).
- 2.7. Распределение Ферми – Дирака.
- 2.8. Распределения Бозе – Эйнштейна.
- 2.9. Условия перехода от квантовой к классической статистике. Критерий вырождения.
- 2.10. Термодинамическое определение температуры. Нулевое начало термодинамики. Абсолютный нуль температуры как температура, соответствующая наименьшему возможному значению энергии.
- 2.11. Молекулярно-кинетическое определение температуры и границы его применимости.
- 2.12. Отрицательные абсолютные температуры и инверсия населённости энергетических уровней. Примеры систем с отрицательной температурой.

2.13. Теплота и работа, их микроскопический смысл. Первый закон термодинамики.

2.14. Уравнения основных термодинамических процессов.

2.15. Второй закон термодинамики для обратимых и необратимых процессов. Основное термодинамическое тождество. Статистический смысл и границы применимости второго начала термодинамики.

2.16. Закон возрастания энтропии в замкнутой системе.

2.17. Цикл Карно. Теоремы Карно.

2.18. Термодинамические потенциалы (внутренняя энергия, свободная энергия, энталпия, термодинамический потенциал Гиббса) и их физический смысл.

2.19. Химический потенциал.

2.20. Третий закон термодинамики (тепловая теорема Нернста). Формулировка Планка. Статистическое обоснование III начала термодинамики. Свойства вещества вблизи абсолютного нуля. Недостижимость абсолютного нуля.

2.21. Теорема о равномерном распределении энергии по степеням свободы в классической статистике.

2.22. Классическая теория теплоемкости идеальных газов и её затруднения. Квантовая теория теплоёмкости двухатомных идеальных газов.

2.23. Свободные электроны в металлах как вырожденный ферми-газ.

2.24. Равновесное тепловое излучение как фотонный газ. Законы излучения абсолютно чёрного тела.

2.25. Явление конденсации Бозе – Эйнштейна.

2.26. Фазовые переходы первого и второго рода. Классификация Эренфеста. Правило фаз Гиббса. Уравнение

Клапейрона – Клаузиуса. Уравнения Эренфеста для скачка теплоёмкости при фазовом переходе второго рода.

2.27. Реальные газы. Уравнение Ван-дер-Ваальса. Физический смысл постоянных Ван-дер-Ваальса.

2.28. Эффект Джоуля – Томсона как следствие отклонения газов от идеальности. Температура инверсии.

2.29. Флуктуации в макроскопических системах (броуновское движение; молекулярное рассеяние света; тепловые флуктуации в электрических цепях).

2.30. Кинетическое уравнение Больцмана в теории неравновесных процессов. Приближение времени релаксации.

# 3 Примеры задач, включаемых в курсовой экзамен по дисциплине «Теоретическая физика»

## Раздел 1 Квантовая механика

### *Одномерное движение*

1.1. Микрочастица находится в одномерной прямоугольной потенциальной яме шириной  $\ell$ . Определить, в каких точках ямы, принадлежащих интервалу  $0 < x < \ell$ , плотность вероятности нахождения частицы в основном и первом возбуждённом состояниях одинакова? Вычислить плотность вероятности для этих точек. Решение проиллюстрировать графически.

1.2. Электрон находится в бесконечно глубокой потенциальной яме шириной  $\ell$ . Вычислить вероятность того, что электрон, находящийся в возбуждённом состоянии ( $n = 2$ ), будет обнаружен в средней трети ямы.

1.3. Электрон в одномерном прямоугольном потенциальном ящике находится в основном состоянии с энергией 10 эВ. Определите ширину этого ящика и покажите, что эта величина согласуется с соотношением неопределённостей Гейзенберга для координаты и импульса.

1.4. Определить среднее значение проекции скорости  $\bar{v}_x$  частицы в одномерной прямоугольной потенциальной яме в основном состоянии.

1.5. Найти волновые функции и уровни энергии частицы в сферически симметричной потенциальной яме радиусом  $r_0$  с идеально отражающими стенками ( $U = 0$  при  $r \leq r_0$ ,  $U \rightarrow \infty$  при

$r > r_0$ ). Рассмотреть случай  $s$  - состояния, в операторе Лапласа учесть только радиальную часть:

$$\nabla^2 \Psi = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r \Psi).$$

1.6. Найти наиболее вероятные положения линейного гармонического осциллятора: а) в основном состоянии; б) в первом возбуждённом состоянии; в) во втором возбуждённом состоянии. Решение проиллюстрировать графически.

1.7. Используя неравенство Гейзенберга для координаты и импульса, определить минимально возможное значение энергии ЛГО. Чем обусловлено существование энергии нулевых колебаний?

1.8. Используя связь энергии  $E$  с неопределенностью координаты  $\Delta x$  для линейного гармонического осциллятора (ЛГО), правило отбора и ненулевые матричные элементы координаты

$$x_{n-1,n} = \langle \Psi_{n-1} | x | \Psi_n \rangle = x_0 \sqrt{\frac{n}{2}},$$

$$x_{n+1,n} = \langle \Psi_{n+1} | x | \Psi_n \rangle = x_0 \sqrt{\frac{n+1}{2}},$$

определить энергетический спектр ЛГО.

1.9. Показать, что для потенциального барьера произвольной формы коэффициенты прохождения и отражения частиц с данной энергией не зависят от того, с какой стороны частицы падают на барьер.

1.10. Во сколько раз надо сузить прямоугольный потенциальный барьер, чтобы вероятность прохождения его протоном и электроном была одинаковой?

## *Движение микрочастицы в центрально-симметричном поле*

1.11. Определить нормированную угловую волновую функцию  $Y_{1,1}$  и угловую плотность вероятности  $|Y_{1,1}|^2$  при  $\ell = m = 1$  ( $p$ -состояние). Построить полярную диаграмму. Вычислить момент импульса и его проекцию на ось  $Z$ , обсудить аналогию с теорией Бора.

1.12. Найти нормированную угловую волновую функцию  $Y_{1,0}$  и угловую плотность вероятности  $|Y_{1,0}|^2$  при  $\ell = 1, m = 0$  ( $p$ -состояние). Построить полярную диаграмму. Вычислить момент импульса и его проекцию на ось  $Z$ , обсудить аналогию с теорией Бора.

1.13. Определить нормированную угловую часть волновой функции  $Y_{2,1}$  и угловую плотность вероятности  $|Y_{2,1}|^2$  в случае  $\ell = 2, m = 1$  для одного из  $d$ -состояний. Построить полярную диаграмму. Вычислить момент импульса и его проекцию на ось  $Z$ , обсудить аналогию с теорией Бора.

1.14. Определить нормированную угловую волновую функцию  $Y_{2,2}$  и угловую плотность вероятности  $|Y_{2,2}|^2$  в случае  $\ell = m = 2$ . Построить полярную диаграмму. Вычислить момент импульса и его проекцию на ось  $Z$ , обсудить аналогию с теорией Бора.

1.15. Электрон в атоме водорода находится в основном состоянии. Определить энергию электрона; возможные значения момента импульса ( $K$ ), его проекции ( $K_z$ ) на ось  $Z$ , проекции магнитного момента ( $\mu_z$ ), наиболее вероятное расстояние электрона от ядра атома.

1.16. Электрон в атоме водорода находится в состоянии  $3d$ . Определить набор квантовых чисел, характеризующих электрон

в данном состоянии; возможные значения момента импульса ( $K$ ), его проекции ( $K_z$ ) на ось  $Z$ , проекции магнитного момента ( $\mu_z$ ), наиболее вероятные направления нахождения электрона относительно оси  $Z$  (на основе анализа полярных диаграмм).

1.17. Вычислить среднее значение кинетической энергии

и среднюю квадратичную скорость  $v_n = \sqrt{v_n^2}$  электрона в атоме водорода в основном состоянии.

1.18. Вычислить наиболее вероятное расстояние  $2p$ - и  $3d$ -электронов от ядра в водородоподобном атоме.

1.19. Вычислить для  $1s$  - электрона в атоме водорода наиболее вероятное расстояние от ядра  $r_{\text{вер}}$  и вероятность пребывания электрона в области  $r < r_{\text{вер}}$ .

1.20. Вычислить для электрона, находящегося в  $1s$  – состоянии в атоме водорода, среднее значение расстояния  $\bar{r}$  от ядра,  $\overline{r^2}$  и  $\overline{(\Delta r)^2}$ . Результаты выразить через радиус первой боровской орбиты  $a$ .

### *Теория возмущений и её приложения*

1.21. Найти поправку первого порядка к энергии частицы в одномерном потенциальном ящике размером  $a$ , если энергия возмущения имеет вид

$$W(x) = \begin{cases} -b, & 0 \leq x \leq \frac{a}{2} \\ +b, & \frac{a}{2} \leq x \leq a. \end{cases}$$

1.22. Вычислить поправку первого порядка малости к невозмущенным уровням энергии и к волновым функциям электрона в центрально-симметричном поле при включении однородного магнитного поля  $\vec{H}$ , направленного вдоль оси  $Z$ .

1.23. Линейный гармонический осциллятор с зарядом  $e$  помещен в однородное электрическое поле напряженностью  $\mathcal{E}$ , направленное вдоль оси колебаний. Рассматривая действие электрического поля как возмущение, найти поправки первого и второго порядка к энергии осциллятора.

1.24. Найти поправку к энергии основного состояния линейного гармонического осциллятора  $E_0^{(1)}$  в первом приближении теории возмущений за счёт ангармонических членов в потенциальной энергии  $\hat{W} = \alpha x^3 + \beta x^4$ , где  $\alpha$  и  $\beta$  – постоянные.

1.25. Найти изотопический сдвиг уровней энергии водородоподобного атома в первом порядке теории возмущений, учитывая движение ядра.

1.26. Атом водорода находится в однородном электрическом поле с напряжённостью  $\mathcal{E}$ , направленной вдоль оси  $Z$ . Найти расщепление уровня энергии, характеризующегося главным квантовым числом  $n = 2$  (эффект Штарка).

1.27. Атом водорода, находящийся в состоянии  $2p$ , помещен в полость с равновесным излучением. При какой температуре вероятности спонтанного и вынужденного излучения будут одинаковыми?

1.28. Используя коэффициент Эйнштейна для спонтанных квантовых переходов  $A_{mn}$ , вычислить отнесённую к единице времени вероятность спонтанного перехода  $2p \rightarrow 1s$  и время жизни в состоянии  $2p$  для атома водорода.

1.29. Проверить справедливость правила отбора для орбитального квантового числа ( $\Delta \ell = \pm 1$ ) на примере  $s, p$  и  $d$ -состояний, вычислив матричные элементы координаты  $z_{sp}, z_{sd}, z_{pd}$  (ограничимся случаем  $m = 0$ ).

1.30. Найти поправку первого порядка к основному уровню энергии водородоподобного атома, обусловленную конечными размерами ядра, считая ядро равномерно заряженным шариком радиуса  $r_0 \approx 10^{-12}$  см. Радиус первой боровской орбиты  $a \approx 10^{-8}$  см. В качестве оператора возмущения принять

$$\hat{W} = \begin{cases} -\frac{Ze^2}{r_0} \left( \frac{3}{2} - \frac{1}{2} \frac{r^2}{r_0^2} \right) + \frac{Ze^2}{r}, & r \leq r_0 \\ 0 \text{ при } r > r_0. \end{cases}$$

Волновая функция основного состояния имеет вид:

$$\Psi_0 = 2 \sqrt{\frac{Z^3}{a^3}} e^{-\frac{Z}{a}r} \cdot \frac{1}{\sqrt{4\pi}}.$$

Оцените относительный сдвиг основного уровня энергии  $\frac{E^{(1)}}{E_1^{(0)}}$  при  $Z \sim 100$ .

*Спин и системы тождественных частиц*

1.31. Найти возможные состояния электрона, имеющего главное квантовое число  $n = 3$ .

1.32. Найти максимальное число электронов в атоме, имеющих следующие одинаковые квантовые числа: а)  $n, \ell, m$ ; б)  $n, \ell$ ; в)  $n$ .

1.33. Найти выражения для операторов повышения  $\hat{S}^+ = \hat{S}_x + i\hat{S}_y$  и понижения  $\hat{S}^- = \hat{S}_x - i\hat{S}_y$  проекции спина в матричной форме; определить их действие на волновые функции  $\Psi_\uparrow = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  и  $\Psi_\downarrow = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ .

1.34. Найти расстояние между отклоненными пучками в опыте Штерна и Герлаха для водорода. Скорость движения

атомов  $v = 2500$  м/с, градиент напряженности магнитного поля  $\frac{\partial H}{\partial z} = 20000$  Эрстед/см, длина пути  $L = 10$  см.

1.35. Вычислить магнитный момент атома водорода в основном состоянии.

1.36. Постройте схему возможных квантовых переходов между термами  ${}^2 P_{3/2}$  и  ${}^2 S_{1/2}$  в слабом магнитном поле и вычислите смещение частоты  $\Delta\omega/\omega_L$  спектральных линий в аномальном эффекте Зеемана.

1.37. Найти скалярное произведение спинов двух частиц  $(\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2)$  в триплетном и синглетном состояниях. Спин частицы равен  $\hbar/2$ .

1.38. Зная экспериментальные значения энергии парастояния  $E_{\text{пара}} = -58,37$  эВ и ортостояния  $E_{\text{орт}} = -59,16$  эВ атома гелия с электронной конфигурацией  $1S^12S^1$ , найти обменную  $A$  и кулоновскую  $K$  энергии взаимодействия электронов.

1.39. Используя правила Хунда, определить полный момент импульса ( $J$ ), суммарный орбитальный момент ( $L$ ), суммарный спиновый момент ( $S$ ) электронной системы атома, основной терм и  $g$ -фактор (множитель Ланде) для следующих систем: ион меди  $Cu^{2+}(3d^9)$ ; атом рутения  $Ru(4d^75s^1)$ ; атом платины  $Pt(5d^96s^1)$ ; ион иттербия  $Yb^{3+}(4f^{13})$ ; ион берклия  $Bk^{2+}(5f^86d^1)$ .

1.40. Доказать, что все механические моменты (орбитальный, спиновый и полный) у целиком заполненных электронных оболочек равны нулю.

## Раздел 2 Статистическая физика (СФ) и термодинамика

*Основные понятия и принципы СФ.*

*Каноническое распределение Гиббса*

2.1. Определить фазовую траекторию линейного гармонического осциллятора (ЛГО) в отсутствие трения.

2.2. Определить фазовые траектории одномерного движения материальных точек в поле силы тяжести и проверить справедливость теоремы Лиувилля.

2.3. Определить фазовую траекторию частицы при наличии силы трения, пропорциональной скорости:  $F_{\text{тр.}} = -\mu v = -\mu \dot{q}$ .

2.4. Вычислить статистический интеграл  $z$  для линейного гармонического осциллятора в классическом и квазиклассическом случаях.

2.5. Записать классическое каноническое распределение по энергиям для ЛГО и определить его среднюю энергию.

2.6. Вычислить статистический интеграл  $z$  для идеального классического газа, состоящего из  $N$  частиц.

2.7. Вычислить статистическую сумму  $z$  для квантового ЛГО. Показать, что в области высоких температур имеет место предельный переход к квазиклассическому случаю.

2.8. Учитывая связь между давлением газа и свободной энергией  $F$ , а также связь свободной энергии со статистическим интегралом  $z$ , показать, что давление  $p$  идеального газа определяется через статистический интеграл следующим выражением:

$$p = \frac{kT}{z} \left( \frac{\partial z}{\partial V} \right)_T.$$

Используя статистический интеграл для идеального классического газа, состоящего из  $N$  частиц, получить уравнение состояния идеального газа.

2.9. Показать, что относительная среднеквадратичная флуктуация энергии идеального газа, описываемого каноническим распределением Гиббса, определяется выражением

$$\frac{\sqrt{\langle(\Delta E)^2\rangle}}{\langle E\rangle} = \frac{\sqrt{kC_V}T}{\langle E\rangle} \sim \frac{1}{\sqrt{N}}.$$

2.10. Учитывая связь энтропии с распределением вероятностей микросостояний

$$S = -k \sum_{i=1}^N W_i \cdot \ln W_i,$$

где  $W_i$  – вероятность  $i$  – го состояния,  $N$  – число всех возможных состояний системы, исследовать её поведение в двухуровневой системе двумя способами:

- 1) применив каноническое распределение Гиббса;
- 2) используя кинетическое уравнение

$$\frac{dW_i}{dt} = \omega(1 - 2W_i),$$

где  $\omega$  – частота перескоков частиц между энергетическими уровнями ( $\omega = \text{const}$ ).

### *Распределение Максвелла – Больцмана*

2.11. Найти среднюю скорость максвелловского распределения. Вычислить эту скорость для молекул водорода и азота при  $T=300$  К.

2.12. Найти среднеквадратичную скорость молекул идеального газа, подчиняющихся распределению Максвелла. Оценить её для молекул азота и кислорода при  $T=300$  К.

2.13. Определить число частиц  $\Delta N/N$ , скорости которых заключены в интервале от нуля до наиболее вероятной скорости.

2.14. Какая часть молекул газа имеет скорость, заключенную между половинным и удвоенным значениями наиболее вероятной скорости, т.е. между  $1/2 v_{\text{B}}$  и  $2 v_{\text{B}}$ ?

2.15. Определить число частиц  $\Delta N/N$ , имеющих скорости меньше средней.

2.16. Какая часть молекул водорода при температуре 300 К обладает скоростями в интервале от 1800 до 1810 м/с?

2.17. Согласно эффекту Доплера, фотон с частотой  $\omega_0$ , испускаемой источником, воспринимается приёмником излучения как фотон с частотой

$$\omega = \omega_0 \left(1 + \frac{v_x}{c}\right),$$

где  $c$  – скорость света,  $v_x$  – проекция относительной скорости движения источника и приёмника. Определить вид функции распределения  $\rho(\omega)$  фотонов с частотой  $\omega$ , воспринимаемой приёмником; полуширину доплеровского уширения спектральной линии  $\Delta\omega$  и относительное доплеровское уширение спектральной линии  $\Delta\omega/\omega_0$ . Масса излучающего атома  $m \sim 100 m_p$ , температура газа  $T \sim 300 K$ . Какое значение может иметь этот эффект для астрофизики?

2.18. Найти число молекул азота, сталкивающихся с площадкой в 1 см<sup>2</sup> за 1 сек при нормальных условиях, если справедливо максвелловское распределение частиц по скоростям.

2.19. Установить связь между давлением идеального газа и средним квадратом скорости молекул. Получить уравнение состояния идеального газа.

2.20. Идеальный классический газ находится в цилиндре радиуса  $R$ , вращающемся с угловой скоростью  $\omega$ . Установить вид функции распределения Больцмана и её зависимость от расстояния  $r$  до оси цилиндра.

2.21. Определить число частиц  $dN$  на расстоянии  $z$  от Земли в столбе воздуха сечением  $S$  и высотой  $dz$ . Высота всего столба воздуха равна  $H$ . Считать, что вблизи поверхности Земли ускорение свободного падения  $g=const$ .

2.22. Для определения числа Авогадро Перрен исследовал распределение по высоте взвешенных в жидкости зёрен гуммигута в однородном поле силы тяжести. Он нашёл, что при температуре 293 К при поднятии вверх на высоту в 100 мкм число взвешенных частиц уменьшается в два раза. Частицы гуммигута имели диаметр  $0.3 \cdot 10^{-4}$  см; плотность жидкости на  $0,2 \text{ г/см}^3$  меньше плотности частиц. Определить по этим данным значение числа Авогадро.

2.23. Какая доля молекул кислорода земной атмосферы может преодолеть гравитационное поле Земли при температуре 300 К?

2.24. Определить среднее значение потенциальной энергии линейного гармонического осциллятора в состоянии статистического равновесия, подчиняющегося распределению Больцмана.

2.25. Определить среднюю высоту частиц газа, находящегося в столбе высотой  $L$  в поле силы тяжести.

2.26. Найти среднюю потенциальную энергию молекулы идеального газа, находящегося в центрифуге радиуса  $R$ , вращающейся с постоянной угловой скоростью  $\omega$ . (Указание: из элемента объёма в цилиндрической системе координат  $dV = r dr d\varphi dz$  выделить радиальную часть  $dV_r = r dr$ ;  $dW = A e^{-\frac{U}{kT} r dr}$ ).

2.27. Вычислить наиболее вероятную энергию  $\varepsilon_B$  молекул в идеальном газе. Показать, что  $\varepsilon_B \neq \frac{1}{2} m v_B^2$ .

2.28. Какая часть молекул идеального газа имеет кинетическую энергию поступательного движения выше средней кинетической энергии  $\bar{\varepsilon} = \frac{3}{2} kT$ ?

2.29. Вычислить поляризацию диэлектрика, состоящего из линейных молекул с постоянным дипольным моментом  $\vec{p}$ , при помещении его в однородное электрическое поле напряжённостью  $\vec{E}$ . В качестве равновесного статистического распределения использовать распределение Больцмана.

2.30. Доказать теорему классической статистики: «В системе заряженных частиц, помещённых во внешнее магнитное поле, в состоянии статистического равновесия отсутствует магнитный момент» (теорема Бора – ван-Леевен – Терлецкого).

### *Квантовая статистика идеального газа*

2.31. Установить зависимость внутренней энергии равновесного излучения от температуры, рассматривая его как фотонный газ, подчиняющийся статистике Бозе – Эйнштейна. Определить микроструктуру постоянной Стефана – Больцмана.

2.32. Определить температуру бозе-конденсации в случае изотопа гелия – 4, если известно, что спин атомов  ${}^4He$  равен нулю, а молярный объём составляет  $27,6 \text{ см}^3$ .

2.33. Найти полное число фотонов в  $1 \text{ см}^3$  равновесного излучения при температуре  $1000 \text{ К}$ .

2.34. Определить температурную зависимость средней энергии и теплоёмкости бозе-газа при температуре, меньшей его температуры бозе-конденсации  $T_0$ . Согласуется ли поведение теплоёмкости при  $T \rightarrow 0$  с третьим началом термодинамики?

2.35. Определить температурную зависимость энтропии вырожденного бозе-газа. Согласуется ли поведение энтропии при  $T \rightarrow 0$  с третьим началом термодинамики?

2.36. Определить температурную зависимость давления бозе-газа при температуре, меньшей его температуры БЭК. Почему в этой области температур вырожденный бозе-газ аналогичен насыщенному пару?

2.37. Концентрация электронов в меди равна  $8,5 \cdot 10^{28} \text{ 1/m}^3$ . При какой температуре происходит переход газа от невырожденного к вырожденному при данной концентрации? Установить, является ли газ вырожденным с данной концентрацией при комнатной температуре.

2.38. Определить температуру вырождения электронного газа в белом карлике, масса которого близка к массе Солнца ( $M_\odot = 2 \cdot 10^{33} \text{ г}$ ), а радиус  $R$  сравним с радиусом Земли.

2.39. Какова вероятность заполнения электронами в металле энергетического уровня, расположенного на 0,01 эВ ниже уровня Ферми, при температуре 200 К?

2.40. Найти долю свободных электронов в металле при 0 К, кинетическая энергия которых больше половины максимальной.

2.41. Найти полную энергию и среднюю энергию одной частицы при  $T=0$  для ультраквантитативистского электронного газа. Энергия частицы связана с импульсом  $p$  соотношением  $\varepsilon = cp$  ( $c$  – скорость света).

2.42. Показать, что для вырожденного ферми-газа имеет место уравнение состояния

$$PV = \frac{2}{3} \bar{E},$$

которое внешне совпадает с аналогичным уравнением для идеального классического газа. В чём заключается существенное различие этих уравнений?

### *Циклические процессы*

2.43. Определить к.п.д. цикла Стирлинга, состоящего из двух изотерм и двух изохор (рис. 1), для 1 моля идеального газа. Сравнить его с к.п.д. цикла Карно с теми же температурами  $T_1$  и  $T_2$ .

2.44. Определить к.п.д. цикла Ленуара (рис. 2), состоящего из изохорного (1-2), адиабатного (2-3) и изобарного (3-1) процессов для 1 моля идеального газа. Выразить к.п.д. сначала через температуры  $T_1, T_2, T_3$ , а затем через параметр цикла  $\delta = \frac{P_2}{P_1}$ .

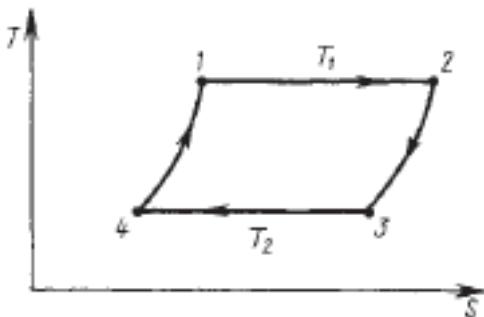


Рисунок 1 – Цикл Стирлинга

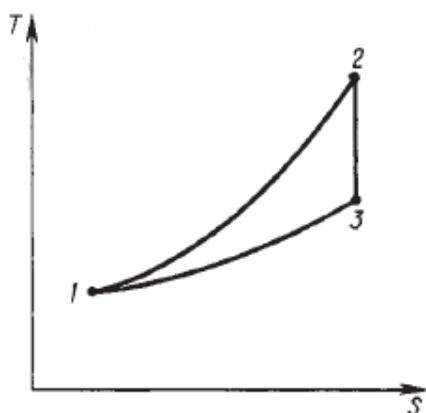


Рисунок 2 – Цикл Ленуара

2.45. В двигателе внутреннего сгорания, работающем по циклу Отто (рис. 3), горючая смесь, вошедшая в цилиндр, адиабатно сжимается (1-2); воспламенённая искрой, изохорно сгорает (2-3); адиабатно расширяется (3-4) и выбрасывается в атмосферу (4-1). Работа производится не за счёт теплоты извне, а за счёт внутренней энергии рабочего вещества (горючей смеси). Определить к.п.д. двигателя и выразить его сначала через  $T_1, T_2, T_3, T_4$ , а затем через параметр цикла  $\varepsilon = \frac{V_1}{V_2}$  (степень сжатия).

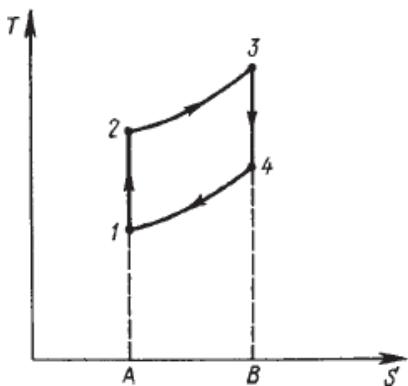


Рисунок 3 – Цикл Отто

2.46. Двигатель внутреннего сгорания, работающий по циклу Дизеля (рис. 4), включает следующие процессы: адиабатное сжатие атмосферного воздуха 1-2, изобарное расширение 2-3 (впрыскивание горючей смеси и её сгорание), адиабатическое расширение 3-4, изохорное охлаждение 4-1. Определить к.п.д. сначала через  $T_1, T_2, T_3, T_4$ , а затем через параметры цикла: степень сжатия  $\varepsilon = \frac{V_1}{V_2}$  и степень предварительного расширения

$\rho = \frac{V_3}{V_4}$ . Учесть, что для 1 моля идеального газа  $dS = \frac{c_p dT}{T} - R \frac{dP}{P}$ .

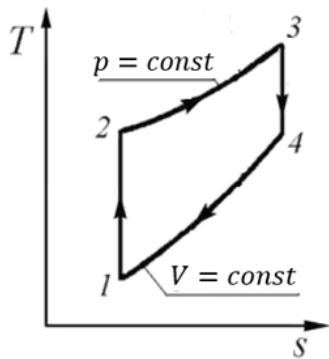


Рисунок 4 – Цикл Дизеля

2.47. Найти коэффициент полезного действия тепловой машины, цикл которой состоит из изобары, изохоры и политропы (рис. 5). В качестве рабочего тела используется идеальный газ с молярной теплоёмкостью при постоянном объёме  $C_V = \frac{3}{2}R$ . Расширение газа в процессе 1-2 происходит по закону  $p = \alpha V$ , где  $\alpha$  – постоянная величина. Отношение максимальной температуры в цикле к минимальной равно 4.

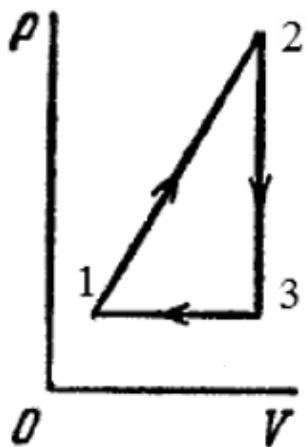


Рисунок 5 – К задаче 2.47

2.48. Определить к.п.д. обратимого цикла Карно с равновесным излучением в качестве рабочего вещества, учитывая, что энтропия равновесного излучения

$$S = \frac{4}{3} \sigma T^3 V$$

и уравнение адиабаты для равновесного излучения имеет вид

$$T^3 V = \text{const.}$$

Согласуется ли полученный результат с первой теоремой Карно?

2.49. На рисунке 6 изображён замкнутый процесс, содержащий изотерму 1 и две пересекающиеся адиабаты (2 и 3). Идеальный газ забирает у термостата теплоту ( $Q > 0$ ) и изотермически расширяется. За счёт этой теплоты за цикл производится положительная работа, что не противоречит первому началу термодинамики. Возможен ли такой процесс? Ответ обосновать.

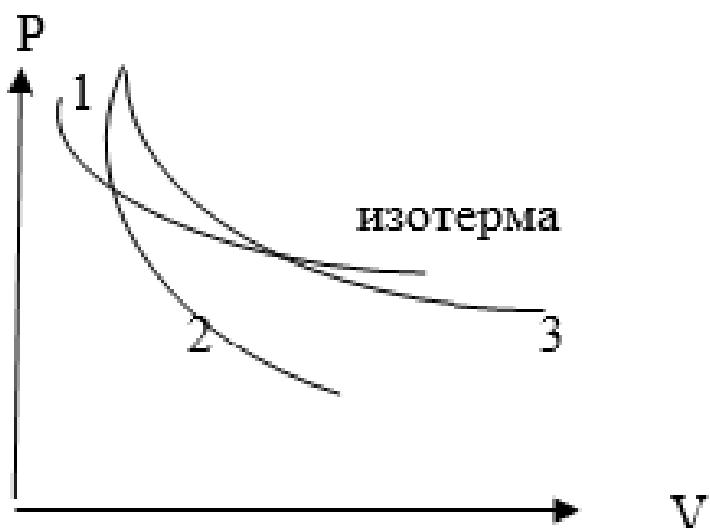


Рисунок 6 – К задаче 2.49

2.50. На рисунке 7 изотерма DEF дважды пересекает одну адиабату ABC. Для замкнутого процесса теплота  $Q = \oint T dS$ . Так как вдоль линии ABC  $dS = 0$ , а вдоль линии DEF  $T = \text{const}$ , то

$$\oint_{DEF} T dS = T \int_{DEF} dS = T(S_F - S_D).$$

Так как точки D и F принадлежат одной адиабате, то  $S_D = S_F$  и работа  $A = 0$ .

Но, с другой стороны,  $A \neq 0$ , так как площадь цикла DEFBD отлична от нуля. Как разрешить это противоречие?

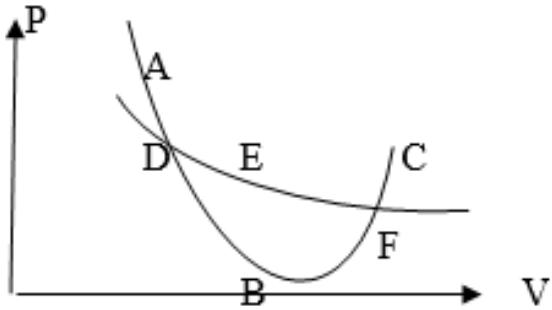


Рисунок 7 – К задаче 2.50

### Энтропия

2.51. Вычислить энтропию 1 моля идеального газа, учитывая основное термодинамическое тождество и уравнение состояния идеального газа.

2.52. Найти изменение энтропии  $\Delta S$  при смешении двух равных масс одного и того же идеального газа, находящихся до смешения при одинаковом давлении  $p$  и различных температурах  $T_1$  и  $T_2$ . Учесть, что для 1 моля идеального газа

$$S = C_V C + R \ell n \frac{V}{N} + S_0 = C_p \ell n T - R \ell n p + S'_0.$$

2.53. Вычислить изменение энтропии  $\Delta S$  при смешении двух равных масс одного и того же идеального газа,

находящихся до смешения при одинаковой температуре  $T$  и различных давлениях  $p_1$  и  $p_2$ .

2.54. Равновесное излучение, занимая первоначально объём  $V$ , адиабатически расширяется без совершения работы в полость с объёмом  $15V$ . Определить, во сколько раз изменится температура и энтропия в этом процессе.

2.55. Определить изменение  $\Delta S$  энтропии при изотермическом расширении кислорода массой  $m = 10$  г от объёма  $V_1 = 25$  л до объёма  $V_2 = 100$  л.

2.56. Во сколько раз изменится вероятность конечного состояния двух тел, приведенных в соприкосновение, если начальные температуры тел равны соответственно  $27$   $^{\circ}\text{C}$  и  $28$   $^{\circ}\text{C}$ , а количество теплоты, передаваемое при тепловом контакте,  $\Delta Q = 10^{-6}$  Дж. (Не забудьте про принцип Больцмана!).

2.57. Газ А объёмом  $3\text{ м}^3$  диффундирует в другой газ В с тем же объёмом  $3\text{ м}^3$  при постоянном общем давлении  $p = 2$  атм и температуре  $0$   $^{\circ}\text{C}$ . Вычислить прирост энтропии, считая газ идеальным. В нормальных условиях при  $p = 2$  атм объём 1 моля составляет  $0,0224\text{ м}^3$ .

2.58. Показать, что в системе, содержащей  $N$  независимых частиц со спином  $1/2$ , наиболее вероятным является состояние молекулярного хаоса (число частиц с противоположным спином одинаково). Определить энтропию, исходя из принципа Больцмана, и показать, что:

- 1) в состоянии молекулярного хаоса энтропия максимальна и равна  $kN \cdot 0,69$ ;
- 2) избыток спинов одного направления приводит к уменьшению энтропии, т.е. к уменьшению беспорядка.

2.59. Пусть газ занимает сначала левую половину свободного объёма сосуда. Согласно законам термодинамики, он должен расширяться и занять весь объём, причём это расширение будет сопровождаться возрастанием энтропии. С точки зрения статистической физики, такое поведение газа является наиболее вероятным. Однако не исключается возможность того, что газ будет не расширяться, а сжиматься, в результате чего частицы газа вновь окажутся в левой половине сосуда. Найти, какое время потребуется, чтобы в результате молекулярного движения все  $N$  молекул снова собрались в левой половине с вероятностью, близкой к 1, например, равной 0.9. Согласуется ли полученный результат с законом возрастания энтропии в замкнутой системе?

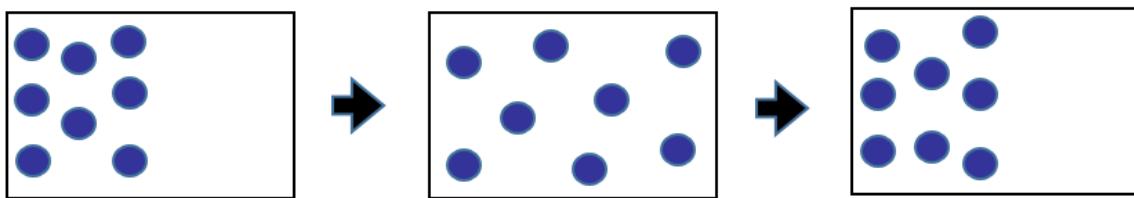


Рисунок 8 – К задаче 2.59

2.60. Демон Максвелла. В 1871 г. Максвелл в работе «Теория теплоты» написал: «Представим себе существо, способности которого настолько изощрены, что оно может следить за каждой молекулой на её пути и в состоянии делать то, что в настоящее время для нас невозможно. Предположим, что имеется сосуд, разделённый на 2 части  $A$  и  $B$  перегородкой с небольшим отверстием и что существо, которое может видеть отдельные молекулы, открывает и закрывает это отверстие так, чтобы дать возможность только более быстрым молекулам перейти из  $A$  в  $B$  и только более медленным перейти из  $B$  в  $A$  (рис. 9).

Это существо, таким образом, без затраты работы повысит температуру в части  $B$  и понизит температуру в части  $A$  вопреки II началу термодинамики». Необходимо разрешить этот парадокс, изгнав демона, т.е. «спасти» второе начало термодинамики!

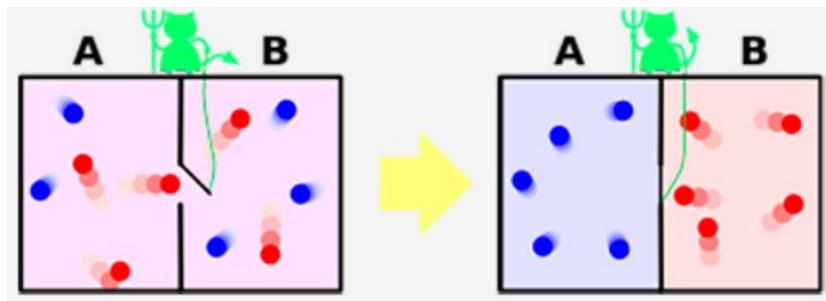


Рисунок 9 – Парадокс Максвелла

2.61. Парадокс Гиббса о скачке энтропии при смешении газов. Вычислить изменение энтропии  $\Delta S$  при изотермическом смешении двух различных газов, разделённых вначале перегородкой (рис. 10), занимающих объёмы  $V_1$  и  $V_2$  и имеющих температуру  $T$  ( $\nu_1$  и  $\nu_2$  – число молей каждого газа). Покажите, что  $\Delta S$  определяется выражением

$$\Delta S = \nu_1 R \ell n[(V_1 + V_2)/V_1] + \nu_2 R \ell n[(V_1 + V_2)/V_2].$$

В частном случае равных количеств газов ( $\nu_1 = \nu_2 = \nu = N/N_A$ ), находящихся до смешения в одинаковых объёмах ( $V_1 = V_2 = V$ ), изменение энтропии после смешения, очевидно, будет иметь вид

$$\Delta S = 2\nu R \ell n 2. \quad (*)$$

Из данной формулы следует, что возрастание энтропии при смешении двух идеальных газов зависит только от числа молей, но не зависит от их природы. При переходе от разных газов

к случаю одинаковых газов возникает парадокс Гиббса: после удаления перегородки никакого термодинамического процесса в системе не происходит, и поэтому увеличения энтропии не должно быть, однако, согласно (\*), энтропия возрастает. Необходимо разрешить данный парадокс.

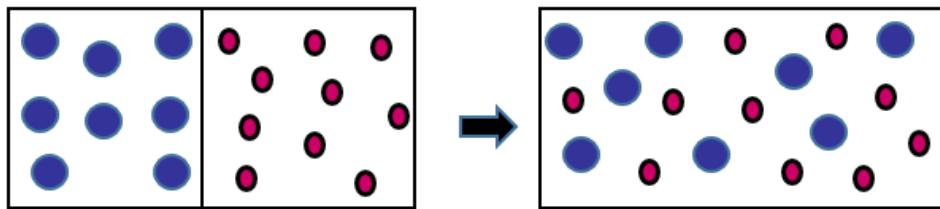


Рисунок 10 – К парадоксу Гиббса

2.62. Найти изменение энтропии при переходе водорода массой  $m = 6$  г от состояния  $V_1 = 20$  л,  $P_1 = 1.5 \cdot 10^5$  Па к состоянию  $V_2 = 60$  л,  $P_2 = 1 \cdot 10^5$  Па.

### *Газ Ван-дер-Ваальса*

2.63. Получить калорическое уравнение состояния газа Ван-дер-Ваальса. Вычислить внутреннюю энергию 2 кмоль кислорода, занимающих объём  $0,01$  м $^3$  при температуре 300 К. Постоянная Ван-дер-Ваальса для кислорода  $a = 1,36 \cdot 10^5$  Н · м $^4$  / кмоль $^2$ .

2.64. В баллоне объёмом  $V = 8$  л находится кислород массой  $m = 0,3$  кг при температуре  $T = 300$  К. Используя уравнение Ван-дер-Ваальса, определить:

- какую часть объёма сосуда составляет собственный объём молекул газа;
- отношение внутреннего давления к давлению газа на стенки сосуда.

2.65. Гелий занимает объём 100 см<sup>3</sup> при давлении 10<sup>8</sup> Н/м<sup>2</sup>.

Найти температуру газа в двух случаях:

- рассматривая его как идеальный газ;
- рассматривая его как реальный газ, подчиняющийся уравнению Ван-дер-Ваальса.

Во сколько раз отличаются полученные результаты?

2.66. Определить температуру инверсии и изменение температуры  $\Delta T$  в эксперименте Джоуля – Томсона с азотом при  $T = 300$  К и перепаде давления  $\Delta p = -0,5$  атм  $= -5,05 \cdot 10^4$  Н/м<sup>2</sup>. Постоянные Ван-дер-Ваальса  $a = 1,36 \cdot 10^5$  Н · м<sup>4</sup>/кмоль<sup>2</sup>,  $b = 39,6 \cdot 10^{-3}$  м<sup>3</sup>/кмоль. Теплоёмкость  $C_p = 1,039 \cdot 10^3$  Дж/кг · К.

### *Фазовые переходы*

2.67. Считая удельную теплоту перехода  $\lambda$  постоянной величиной, показать, что давление насыщенного пара изменяется с изменением температуры по экспоненциальному закону.

2.68. Под каким давлением вода будет кипеть при 95 °С?

Удельная теплота испарения воды 2258,4 Дж/г.

2.69. Одно из возможных объяснений лёгкости скольжения коньков по льду, предложенное более 100 лет назад Дж. Тиндалом и О. Рейнольдсом, основано на использовании уравнения Клапейрона – Клаузиуса для фазовых переходов I рода. Точка плавления льда с повышением давления понижается. Поэтому считается, что под давлением острого конька лёд плавится при температуре  $t < 0$  °С, образуя жидкую смазку, которая и обеспечивает лёгкость скольжения конька по льду. Оцените, какое давление необходимо приложить ко льду, чтобы понизить его

температуру на 1 К. Удельный объём льда при 0 °С составляет 1.091 см<sup>3</sup>/г, воды - 1 см<sup>3</sup>/г. Теплота фазового перехода  $\lambda=335$  Дж/г. Сформулируйте вывод из проведённых вычислений.

2.70. Исследовать фазовый переход образца из нормального (n) в сверхпроводящее (s) состояние в магнитном поле. Температурная зависимость критического магнитного поля в сверхпроводниках (рис. 11) имеет вид

$$H_c(T) = H_0 \left[ 1 - \left( \frac{T}{T_c} \right)^2 \right],$$

где  $H_c$  – напряжённость критического поля, выше которого сверхпроводимость разрушается,  $T_c$  – критическая температура сверхпроводящего перехода.

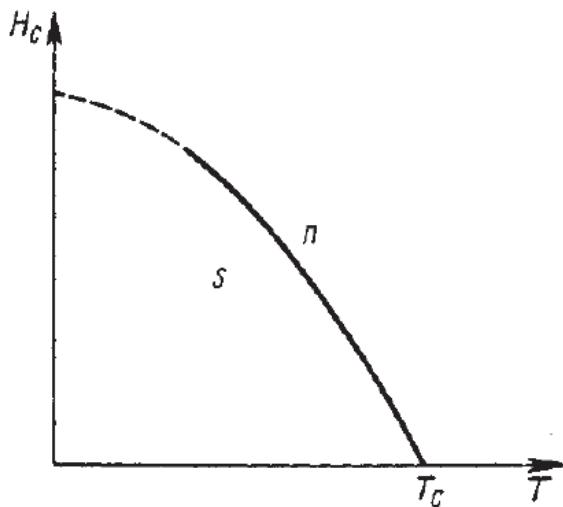


Рисунок 11 – Температурная зависимость критического магнитного поля в сверхпроводниках

Дифференциал термодинамического потенциала Гиббса для магнетика во внешнем магнитном поле  $H$  равен

$$dG = -SdT - MdH,$$

где  $M$  – намагниченность. В случае сверхпроводника имеет место эффект Мейсснера (выталкивание магнитного поля из

образца при  $H < H_c$ ), поэтому для сверхпроводящего состояния  $M_s = -\frac{1}{4\pi}H$ . Получить основное уравнение термодинамики сверхпроводников

$$G_n(H_c, T) - G_S(0, T) = \frac{H_c^2}{8\pi}.$$

На этой основе, учитывая, что  $S = -\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_H$ , показать, что разность энтропий сверхпроводящего и нормального состояния определяется выражением

$$S_S(0, T) - S_n(0, T) = \frac{H_c}{4\pi} \frac{dH_c}{dT}.$$

Установить, какая фаза является более упорядоченной в области  $0 < T < T_c$ : сверхпроводящая или нормальная. Определить теплоту фазового перехода из нормального состояния в сверхпроводящее и показать, что переход в сверхпроводящее состояние сопровождается выделением тепла.

## 4 Примеры решения задач по разделу «Квантовая механика»

1.1. Показать, что для потенциальной ступеньки произвольной формы автоматически выполняется соотношение

$$R(E) + D(E) = 1,$$

где  $R$  – коэффициент отражения,  $D$  – коэффициент прохождения частиц.

### РЕШЕНИЕ

Рассмотрим барьер наиболее общего вида, когда поле  $U(x)$  имеет вид потенциальной ступеньки (рис. 12)

$$U(x) \rightarrow \begin{cases} 0 & \text{при } x \rightarrow -\infty, \\ U_0 & \text{при } x \rightarrow +\infty. \end{cases}$$

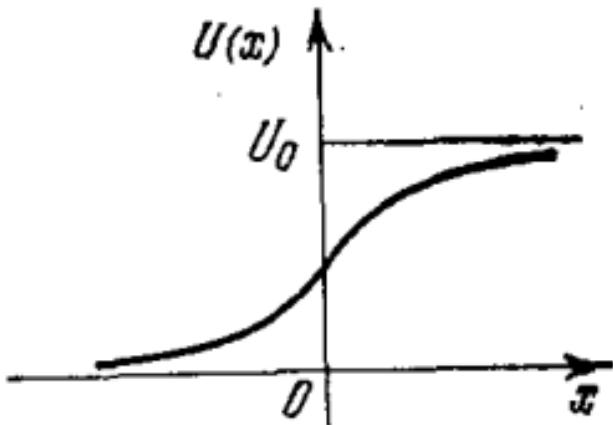


Рисунок 12 – Потенциальная ступенька

Для определённости полагаем, что падающие частицы движутся в положительном направлении оси  $x$ .

Волновая функция удовлетворяет уравнению Шрёдингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + U\Psi = E\Psi \quad (1.1)$$

и имеет следующие асимптотики при  $x \rightarrow \pm\infty$ :

$$\Psi(x) \approx \begin{cases} A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}, & x \rightarrow -\infty, \\ A_2 e^{ik_1 x}, & x \rightarrow +\infty. \end{cases} \quad (1.2)$$

Падающая волна характеризуется амплитудой  $A_1 = 1$  (поскольку вероятность нахождения частиц слева от барьера  $|A_1|^2 = 1$ ), отражённая волна – амплитудой  $B_1$ , прошедшая в область существования барьера – амплитудой  $A_2$ . Волновые числа  $k$  и  $k_1$  в каждой из двух областей имеют вид

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad k_1 = \sqrt{\frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2}}.$$

Запишем уравнение, комплексно сопряжённое уравнению (1.1):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi^* + U \Psi^* = E \Psi^*. \quad (1.3)$$

Умножая уравнение (1.1) слева на  $\Psi^*$ , а (1.3) – на  $\Psi$  и вычитая почленно друг из друга, находим

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} (\Psi^* \nabla^2 \Psi - \Psi \nabla^2 \Psi^*) &= 0, \\ \Psi^* \Psi'' - \Psi \Psi^{*''} &= 0, \end{aligned}$$

или

$$\frac{d}{dx} (\Psi^* \Psi' - \Psi \Psi^{*'}) = 0.$$

Отсюда следует, что

$$\Psi^* \Psi' - \Psi \Psi^{*'} = \text{const.} \quad (1.4)$$

Коэффициенты отражения и прозрачности определяются следующим образом:

$$R = \frac{j_{\text{отр}}}{j_{\text{пад}}} = |B_1|^2, \quad D = \frac{j_{\text{прош}}}{j_{\text{пад}}} = |A_2|^2 \frac{k_1}{k}. \quad (1.5)$$

Для их вычисления необходимо вычислить значения левой части соотношения (1.4) при  $x \rightarrow \pm\infty$  с помощью выражений (1.2).

Записывая левую часть (1.4) для  $x \rightarrow -\infty$ , а правую – для  $x \rightarrow +\infty$ , будем иметь:

$$\begin{aligned}
 & (e^{-ikx} + B_1 e^{ikx}) ik (e^{ikx} - B_1 e^{-ikx}) - \\
 & - (e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}) ik (-e^{-ikx} + B_1 e^{ikx}) = \\
 & = A_2 e^{-ik_1 x} ik_1 A_2 e^{ik_1 x} - A_2 e^{ik_1 x} (-ik_1) A_2 e^{-ik_1 x}.
 \end{aligned}$$

Раскрывая скобки и сокращая обе части этого выражения на одинаковые экспоненты, получим

$$B_1^2 + \frac{k_1}{k} A_2^2 = 1.$$

Таким образом,  $R(E) + D(E) = 1$ , что и требовалось доказать.

1.2. Найти энергетический спектр микрочастицы в потенциальной яме (рис. 13)

$$U = \begin{cases} \infty & \text{при } x \leq 0, \\ 0 & \text{при } 0 < x < l, \\ U_0 & \text{при } x \geq l. \end{cases}$$

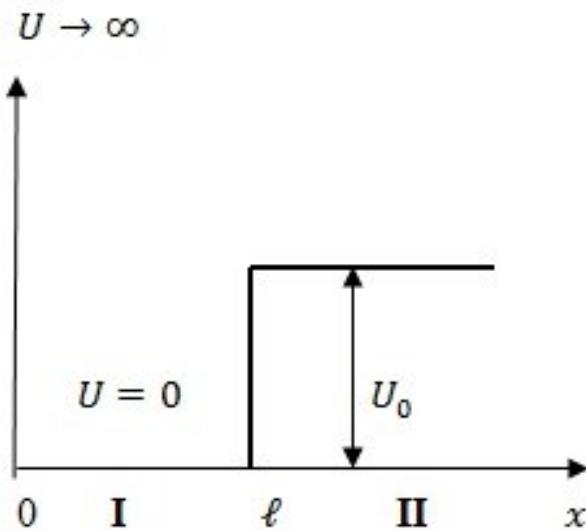


Рисунок 13 – Яма конечной глубины

## РЕШЕНИЕ

Поскольку при  $x < 0$  потенциальная энергия обращается в бесконечность, частица не может проникнуть в эту область. Поэтому задача сводится к отысканию волновой функции при  $x > 0$ .

Запишем уравнение Шрёдингера в областях I и II:

$$\frac{d^2\Psi_1}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\Psi_1 = 0, \quad (1.6)$$

$$\frac{d^2\Psi_2}{dx^2} + \frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2}\Psi_2. \quad (1.7)$$

Рассмотрим два случая.

1.  $E > U_0$ .

В области I уравнение Шрёдингера имеет вид

$$\Psi_1'' + k_1^2\Psi_1 = 0, \quad \text{где } k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}. \quad (1.8)$$

В области II

$$\Psi_2'' + k_2^2\Psi_2 = 0, \quad \text{где } k_2^2 = \frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2}. \quad (1.9)$$

Решения для каждой из этих областей можно записать следующим образом:

$$\Psi_1 = A_1 \sin k_1 x + B_1 \cos k_1 x, \quad (1.10)$$

$$\Psi_2 = A_2 \sin k_2(x - \ell) + B_2 \cos k_2(x - \ell). \quad (1.11)$$

Используя граничное условие  $\Psi_1(0) = 0$ , находим, что  $B_1 = 0$ . Условия непрерывности функции и ее первой производной в точке  $x = \ell$

$$\begin{aligned} \Psi_1(\ell) &= \Psi_2(\ell), \\ \Psi_1'(\ell) &= \Psi_2'(\ell) \end{aligned}$$

приводят к следующим выражениям

$$A_2 = \frac{A_1 k_1}{k_2} \cos k_1 \ell, B_2 = A_1 \sin k_1 \ell. \quad (1.12)$$

Эти условия всегда могут быть выполнены, поэтому энергетический спектр при инфинитном движении является непрерывным.

2.  $E < U_0$ .

Уравнение Шрёдингера для области I остается без изменений. Чтобы записать его для области II, учтем, что в рассматриваемом случае

$$k_2 = \sqrt{-\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}} = ik, \quad (1.13)$$

где

$$k = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}}. \quad (1.14)$$

Таким образом, с учетом того, что волновое число  $k_2$  оказывается мнимым, уравнение Шрёдингера в области II запишется в виде

$$\Psi_2'' - k^2 \Psi_2 = 0. \quad (1.15)$$

Решениями этого уравнения для областей I и II являются функции

$$\Psi_1 = A_1 \sin k_1 x, \quad (1.16)$$

$$\Psi_2 = C_2 e^{ik_2 x} = C_2 e^{-kx}. \quad (1.17)$$

Условия «сшивания» функций (1.16) и (1.17) имеют вид

$$A_1 \sin k_1 \ell = C_2 e^{-k\ell}, \quad A_1 k_1 \cos k_1 \ell = -k C_2 e^{-k\ell}.$$

Разделив почленно второе уравнение на первое, получим условие квантования энергии:

$$ctg k_1 \ell = -\frac{k}{k_1}. \quad (1.18)$$

Решение этого уравнения находится графическим методом. Заметим, что

$$\sin k_1 \ell = \frac{1}{\sqrt{1 + ctg^2 k_1 \ell}} = \sqrt{\frac{E}{U_0}} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m\ell^2 U_0}} k_1 \ell.$$

Введем следующее обозначение:  $y = k_1 \ell$ , тогда уравнение (1.18) принимает вид

$$\sin y = \frac{\hbar}{\sqrt{2m\ell^2 U_0}} y. \quad (1.19)$$

Его решениями являются точки пересечения синусоиды  $z = \sin y$  с прямой

$z = \frac{\hbar}{\sqrt{2m\ell^2 U_0}} y$ . При этом следует выбирать только те точки, ко-

торые согласуются со знаком в уравнении (1.18), т.е. те, которые принадлежат четным четвертям (рис. 14).

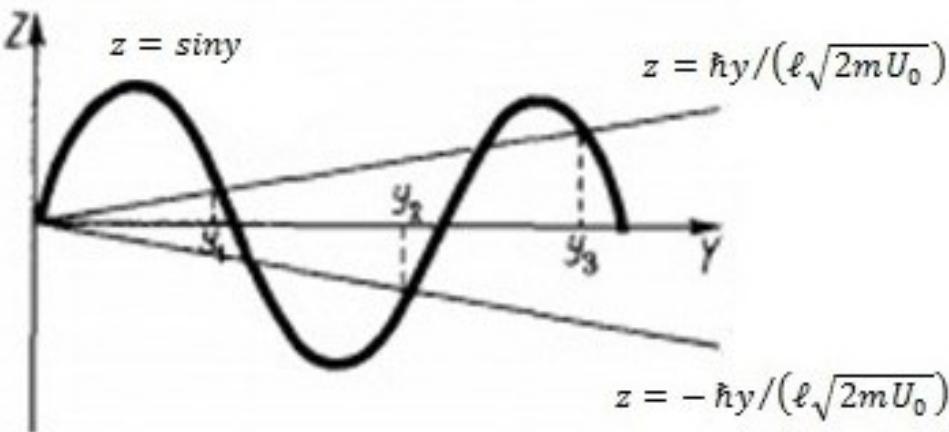


Рисунок 14 – Графическое решение уравнения (1.19)

В результате получится конечное число значений  $y_n$ , которым соответствует конечное число собственных значений энергии

$$E_n = \frac{\hbar^2 y_n^2}{2m\ell^2}. \quad (1.20)$$

В случае ямы малой глубины может оказаться, что ни одного собственного значения энергии не существует.

Из решения (1.17) следует, что имеется экспоненциально убывающая с ростом  $x$ , но конечная вероятность нахождения частицы с энергией  $E < U_0$  в области  $x > \ell$ . Этот эффект означает возможность прохождения микрочастицы через потенциальный барьер.

Из рассмотренной задачи вытекают следующие выводы:

1. При инфинитном (неограниченном) движении микрочастицы ее энергетический спектр является непрерывным. При ограниченном (финитном) движении энергетический спектр является дискретным.

2. В потенциальной яме конечной глубины имеется конечное число собственных значений энергии. Если глубина ямы слишком мала, то возможна ситуация, когда ни одного собственного значения энергии не существует.

3. В случае потенциальной ямы конечной глубины существует отличная от нуля вероятность проникновения частицы в область, где  $E < U_0$ .

1.3. Найти коэффициент прозрачности потенциального барьера, для которого потенциальная энергия имеет вид (рис.15)

$$U = \begin{cases} 0 & \text{при } x < 0, \\ U_1 & \text{при } 0 \leq x \leq \ell, \\ U_2 & \text{при } x > \ell. \end{cases}$$

Энергия падающей частицы, движущейся в положительном направлении оси  $x$ , удовлетворяет условию  $U_2 < E < U_1$ .

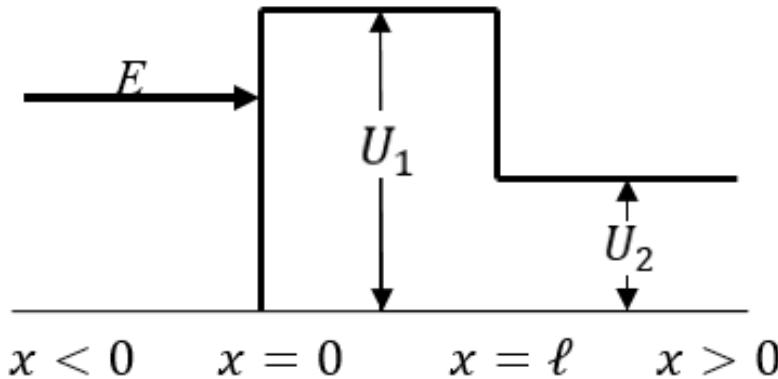


Рисунок 15 – Потенциальный барьер сложной формы

### РЕШЕНИЕ

Запишем уравнение Шрёдингера для каждой из трех областей:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \Psi_1 &= 0, \quad x < 0, \\ \frac{\partial^2 \Psi_2}{\partial x^2} + \frac{2m(E - U_1)}{\hbar^2} \Psi_2 &= 0, \quad 0 \leq x \leq l, \\ \frac{\partial^2 \Psi_3}{\partial x^2} + \frac{2m(E - U_2)}{\hbar^2} \Psi_3 &= 0, \quad x > l. \end{aligned}$$

Решение этих уравнений имеет вид:

$$\begin{aligned} \Psi_1 &= A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}, \\ \Psi_2 &= A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x}, \\ \Psi_3 &= A_3 e^{ik_3 x}, \end{aligned}$$

где волновые числа

$$k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad k_2 = \sqrt{\frac{2m(U_1 - E)}{\hbar^2}}, \quad k_3 = \sqrt{\frac{2m(E - U_2)}{\hbar^2}}.$$

Условия непрерывности волновой функции вместе с её производной на границах барьера

$$\begin{cases} \Psi_1(0) = \Psi_2(0) \\ \Psi'_1(0) = \Psi'_2(0) \end{cases},$$

$$\begin{cases} \Psi_2(\ell) = \Psi_3(\ell) \\ \Psi'_2(\ell) = \Psi'_3(\ell) \end{cases}$$

приводят к следующим уравнениям

$$\begin{cases} A_1 + B_1 = A_2 + B_2 \\ ik_1(A_1 - B_1) = -k_2(B_2 - A_2) \end{cases} \quad (1.21)$$

$$\begin{cases} A_2 e^{k_2 \ell} + B_2 e^{-k_2 \ell} = A_3 e^{i k_3 \ell} \\ k_2(A_2 e^{k_2 \ell} - B_2 e^{-k_2 \ell}) = ik_3 A_3 e^{i k_3 \ell}. \end{cases} \quad (1.22)$$

Исключая из этих уравнений величины  $A_2, B_1$  и  $B_2$ , находим связь между коэффициентами  $A_3$  и  $A_1$ . Для упрощения расчётов учтём, что неравенство  $k_1 \ell \gg 1$  всегда можно считать выполненным и что можно пренебречь величинами, пропорциональными  $e^{-k_2 \ell}$  по сравнению с величинами, пропорциональными  $e^{k_2 \ell}$ . Тогда находим для отношения  $A_3/A_1$ :

$$\frac{A_3}{A_1} = \frac{4ik_1 k_2}{(ik_1 - k_2)(k_2 - ik_3)} e^{-k_2 \ell} e^{ik_3 \ell}.$$

Соответственно коэффициент прохождения равен:

$$D = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} = \frac{16k_1^2 k_2^2}{(k_1^2 + k_2^2)(k_2^2 + k_3^2)} e^{-2k_2 \ell}. \quad (1.23)$$

1.4. Получить правила отбора и отличные от нуля матричные элементы координаты для линейного гармонического осциллятора (ЛГО).

РЕШЕНИЕ

Волновые функции стационарных состояний ЛГО  
имеют вид

$$\Psi_n = C_n e^{-\frac{\xi^2}{2}} \cdot H_n(\xi), \quad (1.24)$$

где

$$C_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n! x_0 \sqrt{\pi}}}, \quad x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, \quad \xi = \frac{x}{x_0}, \quad (1.25)$$

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} (e^{-\xi^2}) \quad (1.26)$$

– полиномы Эрмита – Чебышёва, являющиеся решениями дифференциального уравнения второго порядка

$$H_n'' - 2\xi H_n' + 2nH_n = 0.$$

Вначале установим рекуррентное соотношение между полиномами (1.26). Найдем производную

$$\begin{aligned} \frac{d^{n+1}}{d\xi^{n+1}} (e^{-\xi^2}) &= \frac{d^n}{d\xi^n} \frac{d}{d\xi} (e^{-\xi^2}) = -2 \frac{d^n}{d\xi^n} (e^{-\xi^2} \cdot \xi) = \\ &= -2 (e^{-\xi^2} \cdot \xi)^{(n)} = -2(u \cdot v)^{(n)}. \end{aligned}$$

Учитывая формулу Лейбница

$$\begin{aligned} (u \cdot v)^{(n)} &= u^{(n)} v^0 + n u^{(n-1)} v^{(1)} + \frac{n(n-1)}{2} u^{(n-2)} v^{(2)} + \dots + \\ &\quad + u^{(0)} v^{(n)}, \end{aligned}$$

получим

$$(e^{-\xi^2})^{(n+1)} = -2 \left[ (e^{-\xi^2})^{(n)} \cdot \xi + n (e^{-\xi^2})^{(n-1)} \cdot 1 \right].$$

Умножая обе части этой формулы на  $(-1)^{(n+1)} e^{\xi^2}$ , получаем рекуррентное соотношение, связывающее между собой полиномы  $H_{n+1}, H_n, H_{n-1}$ :

$$H_{n+1} = 2\xi H_n - 2nH_{n-1}. \quad (1.27)$$

Используя (1.27), вычислим следующее произведение:

$$\begin{aligned} x\Psi_n &= x_0 C_n e^{-\frac{\xi^2}{2}} \xi H_n = x_0 C_n e^{-\frac{\xi^2}{2}} \left( \frac{1}{2} H_{n+1} + n H_{n-1} \right) = \\ &= x_0 C_n e^{-\frac{\xi^2}{2}} \left( \frac{1}{2} \frac{\Psi_{n+1}}{C_{n+1}} e^{\frac{\xi^2}{2}} + n \frac{\Psi_{n-1}}{C_{n-1}} e^{\frac{\xi^2}{2}} \right). \end{aligned}$$

Учитывая (1.25), находим, что

$$C_{n+1} = \frac{1}{\sqrt{2^{n+1}(n+1)! x_0 \sqrt{\pi}}}, \quad C_{n-1} = \frac{1}{\sqrt{2^{n-1}(n-1)! x_0 \sqrt{\pi}}}.$$

Поэтому

$$x\Psi_n = x_0 \left( \sqrt{\frac{n+1}{2}} \Psi_{n+1} + \sqrt{\frac{n}{2}} \Psi_{n-1} \right).$$

Полученная формула позволяет вычислить отличные от нуля матричные элементы:

$$\langle \Psi_m | x | \Psi_n \rangle = x_0 \left( \sqrt{\frac{n+1}{2}} + \langle \Psi_m | \Psi_{n+1} \rangle + \sqrt{\frac{n}{2}} \langle \Psi_m | \Psi_{n-1} \rangle \right).$$

Учитывая условие ортонормировки волновых функций

$$\langle \Psi_m | \Psi_{n+1} \rangle = \delta_{m,n+1}, \quad \langle \Psi_m | \Psi_{n-1} \rangle = \delta_{m,n-1},$$

получаем

$$\langle \Psi_m | x | \Psi_n \rangle = x_0 \left( \sqrt{\frac{n+1}{2}} \delta_{m,n+1} + \sqrt{\frac{n}{2}} \delta_{m,n-1} \right). \quad (1.28)$$

Из (1.28) следует, что ненулевые матричные элементы координаты определяются значениями  $\delta$ -символа Кронекера. Они будут отличны от нуля в двух случаях:

- 1)  $m = n + 1$ , если  $\delta_{m,n+1} = 1$ ;
- 2)  $m = n - 1$ , если  $\delta_{m,n-1} = 1$ .

Обозначив  $m = n'$ , приходим к правилам отбора для квантового числа  $n$ :

$$n' = n - 1, n' = n + 1, \quad (1.29)$$

или

$$\Delta n = \pm 1 \quad (1.30)$$

Правила отбора (1.29), (1.30) означают, что для осциллятора возможны квантовые переходы только между соседними энергетическими уровнями (рис. 16). При этом отличные от нуля матричные элементы определяются выражениями

$$x_{n-1,n} = \langle \Psi_{n-1} | x | \Psi_n \rangle = x_0 \sqrt{\frac{n}{2}}, \quad (1.32)$$

$$x_{n+1,n} = \langle \Psi_{n+1} | x | \Psi_n \rangle = x_0 \sqrt{\frac{n+1}{2}}. \quad (1.33)$$

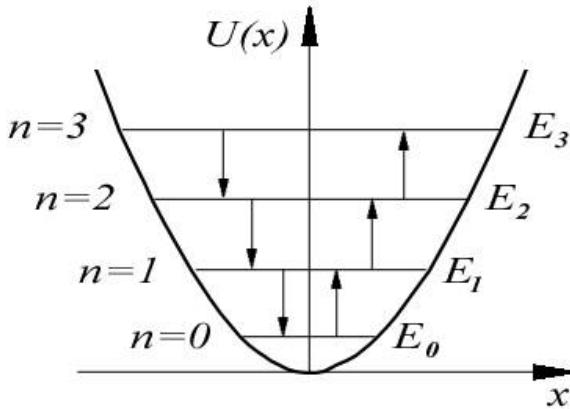


Рисунок 16 – Правила отбора, разрешающие переходы только между соседними уровнями энергии

1.5. Определить уровни энергии и радиальную часть волновой функции частицы массы  $m_0$  в бесконечно глубокой сферически симметричной потенциальной яме радиусом  $a$ , когда потенциальная энергия описывается выражением

$$U(r) = \begin{cases} 0, & \text{если } r \leq a, \\ \infty, & \text{если } r > a. \end{cases}$$

### РЕШЕНИЕ

Волновая функция частицы содержит радиальную и угловую части:

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

где  $A$  – нормировочная константа. Радиальная функция  $R(r)$  удовлетворяет радиальному уравнению Шрёдингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \left( \frac{\partial^2 R}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{\hbar^2 \ell(\ell + 1)}{2m_0 r^2} R + U(r) R = E R. \quad (1.34)$$

При  $r \leq a$  частица движется свободно,  $U(r) = 0$ , с определённым значением орбитального квантового числа  $\ell$  и орбитального момента.

Введём обозначение

$$\rho = \sqrt{\frac{2m_0 E}{\hbar^2}} \cdot r = kr.$$

Тогда

$$\frac{\partial \rho}{\partial r} = k, \quad \frac{\partial R}{\partial r} = \frac{\partial R}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{\partial r} = k \frac{\partial R}{\partial \rho}, \quad \frac{\partial^2 R}{\partial r^2} = k^2 \frac{\partial^2 R}{\partial \rho^2}.$$

Поэтому радиальное уравнение принимает вид

$$\frac{\partial^2 R}{\partial \rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{\partial R}{\partial \rho} - \frac{\ell(\ell + 1)}{\rho^2} R + R = 0. \quad (1.35)$$

1. Рассмотрим случай  $s$  – состояния ( $\ell = 0$ ).

В этом случае уравнение (1.35) имеет вид

$$\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} (\rho R) = -\rho R.$$

Общее решение этого уравнения:

$$\rho R = A \sin \rho + B \cos \rho,$$

откуда следует, что

$$R = A \frac{\sin \rho}{\rho} + B \frac{\cos \rho}{\rho}.$$

Поскольку второе слагаемое не удовлетворяет условию конечности волновой функции

$$\frac{\cos \rho}{\rho} \rightarrow \infty \text{ при } \rho \rightarrow 0,$$

решением являются функции

$$R = A \frac{\sin \rho}{\rho} = A \frac{\sin kr}{kr}. \quad (1.36)$$

Для нахождения уровней энергии используем граничное условие  $R(a) = 0$ , поскольку при  $r \geq a$  частица не может проникнуть в область бесконечно большой потенциальной энергии,

$$A \frac{\sin ka}{ka} = 0.$$

Отсюда следует:

$$ka = \pi n, \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0},$$

что соответствует энергии свободно движущейся частицы с волновым вектором  $k$ .

Таким образом, в случае  $s$  – состояния энергетический спектр имеет вид

$$E_n = \frac{n^2 \hbar^2}{8m_0 a^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (1.37)$$

совпадающий с уровнями энергии частицы в прямоугольной бесконечно глубокой потенциальной яме шириной  $a$ .

2. Перейдём к случаю  $\ell \neq 0$ .

Вначале определим функцию  $R$  при  $\rho \rightarrow 0$ . Учитывая, что

$$\frac{\ell(\ell + 1)}{\rho^2} \rightarrow \infty \text{ при } \rho \rightarrow 0,$$

можно пренебречь последним членом в левой части уравнения (1.35). Приходим к уравнению

$$\frac{\partial^2 R}{\partial \rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{\partial R}{\partial \rho} - \frac{\ell(\ell + 1)}{\rho^2} R = 0. \quad (1.38)$$

Его решением является степенная функция

$$R = \rho^\gamma. \quad (1.39)$$

Подставляя (1.39) в (1.38) и вычисляя соответствующие производные, находим, что  $\gamma$  удовлетворяет уравнению

$$\gamma(\gamma + 1) = \ell(\ell + 1),$$

имеющему два корня

$$\gamma_1 = \ell, \quad \gamma_2 = -(\ell + 1).$$

Второй корень не удовлетворяет требованию конечности волновой функции:

$$\frac{1}{\rho^{\ell+1}} \rightarrow \infty \text{ при } \rho \rightarrow 0.$$

Поэтому на малых расстояниях от центра ямы остаётся решение

$$R_0 = \rho^\ell. \quad (1.40)$$

Теперь определим функцию  $R$  при  $\rho \neq 0$ .

Сделаем подстановку

$$R(\rho) = \rho^\ell \cdot f_\ell(r), \quad (1.41)$$

где  $f_\ell(r)$  – пока не известная функция. Подставляя (1.41) в уравнение (1.35), получим уравнение для функции  $f_\ell$

$$\frac{\partial^2 f_\ell}{\partial \rho^2} + \frac{2}{\rho}(\ell + 1) \frac{\partial f_\ell}{\partial \rho} + f_\ell = 0. \quad (1.42)$$

Сделаем замену в этом уравнении:  $\ell \rightarrow \ell + 1$ , получим

$$\frac{\partial^2 f_{\ell+1}}{\partial \rho^2} + \frac{2}{\rho}(\ell + 2) \frac{\partial f_{\ell+1}}{\partial \rho} + f_{\ell+1} = 0. \quad (1.43)$$

Продифференцировав (1.42) по  $\rho$  и сравнивая получившееся при этом уравнение с (1.43), находим рекуррентное соотношение между функциями  $f_{\ell+1}$  и  $f_\ell$ :

$$f_{\ell+1} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial f_\ell}{\partial \rho}. \quad (1.44)$$

Эта формула позволяет производить последовательное вычисление функций:

$$f_1 = \frac{1}{\rho} \frac{\partial f_0}{\partial \rho}, f_2 = \frac{1}{\rho} \frac{\partial f_1}{\partial \rho} \text{ и т. д.}$$

Учитывая, что функция  $f_0$  нам уже известна и, согласно (1.36), имеет вид

$$f_0 = \frac{\sin \rho}{\rho},$$

можно найти последующие функции:

$$f_1 = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \frac{\sin \rho}{\rho} \right), \quad f_2 = \left( \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \right)^2 \left( \frac{\sin \rho}{\rho} \right) \text{ и т. д.}$$

Соответствующие радиальные функции, согласно (1.41), будут иметь вид

$$R_1 = \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \frac{\sin \rho}{\rho} \right), R_2 = \rho^2 \left( \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \right)^2 \left( \frac{\sin \rho}{\rho} \right), \dots$$

Обобщая полученные результаты, находим следующее выражение для радиальных функций при произвольных значениях  $\ell$ :

$$R_\ell = \rho^\ell \left( \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \right)^\ell \left( \frac{\sin \rho}{\rho} \right). \quad (1.45)$$

Вычислив по формуле (1.45) несколько первых функций, замечаем, что они совпадают со сферическими функциями Бесселя (с точностью до нормировочного множителя):

$$J_0 = \frac{\sin x}{x}, \quad J_1 = \frac{\sin x}{x^2} - \frac{\cos x}{x}, \quad J_2 = \left( \frac{3}{x^3} - \frac{1}{x} \right) \sin x - \frac{3 \cos x}{x^2}. \quad (1.46)$$

Для получения энергетического спектра используем граничные условия

$$R_\ell(a) = 0, \quad \rho(a) = \sqrt{\frac{2m_0 E}{\hbar^2}} a = x_{n\ell}, \quad (1.47)$$

где  $x_{n\ell}$  – корни сферической функции Бесселя  $\ell$  – го порядка,  $n$  – главное квантовое число, т.е. номер корня в порядке возрастания его величины. Имеем

$$E_{n\ell} = \frac{\hbar^2 x_{n\ell}^2}{2m_0 a^2}. \quad (1.48)$$

Состояния  $n\ell$  кратко обозначают малой латинской буквой, соответствующей значению  $\ell$ , перед которой ставится число, указывающее значение  $n$ . Порядок их расположения следующий:  $1s, 1p, 1d, 2s, 1f, 2p, 1g, 2d, 1h, 3s, 2f, \dots$

Такое обозначение принято для уровней энергии нуклонов в атомном ядре.

В таблице 3 приведены значения корней  $x_{n\ell}$  сферических функций Бесселя для первых шести состояний. Пользуясь таблицей 3, можно вычислить энергию частицы с помощью формулы (1.48).

Таблица 3 – Значение корней сферических функций Бесселя

Состояние	$x_{n\ell}$	Состояние	$x_{n\ell}$
$1s$	3,142	$2s$	6,283
$1p$	4,493	$1f$	6,988
$1d$	5,763	$2p$	7,725

В качестве примера рассмотрим состояние

$$R_1 = \frac{\sin x}{x^2} - \frac{\cos x}{x}.$$

Наложим граничное условие  $R_1(a) = 0$ , получим

$$\frac{\sin x}{x^2} = \frac{\cos x}{x},$$

или

$$\operatorname{tg} x = x.$$

Данное уравнение можно решить графически. Корни этого уравнения изображаются точками пересечения прямой  $y = x$  и кривой  $y = \operatorname{tg} x$  (рис. 17). Первый корень  $x = 0$  не подходит, второй – в соответствии с таблицей 3 равен 4,493.

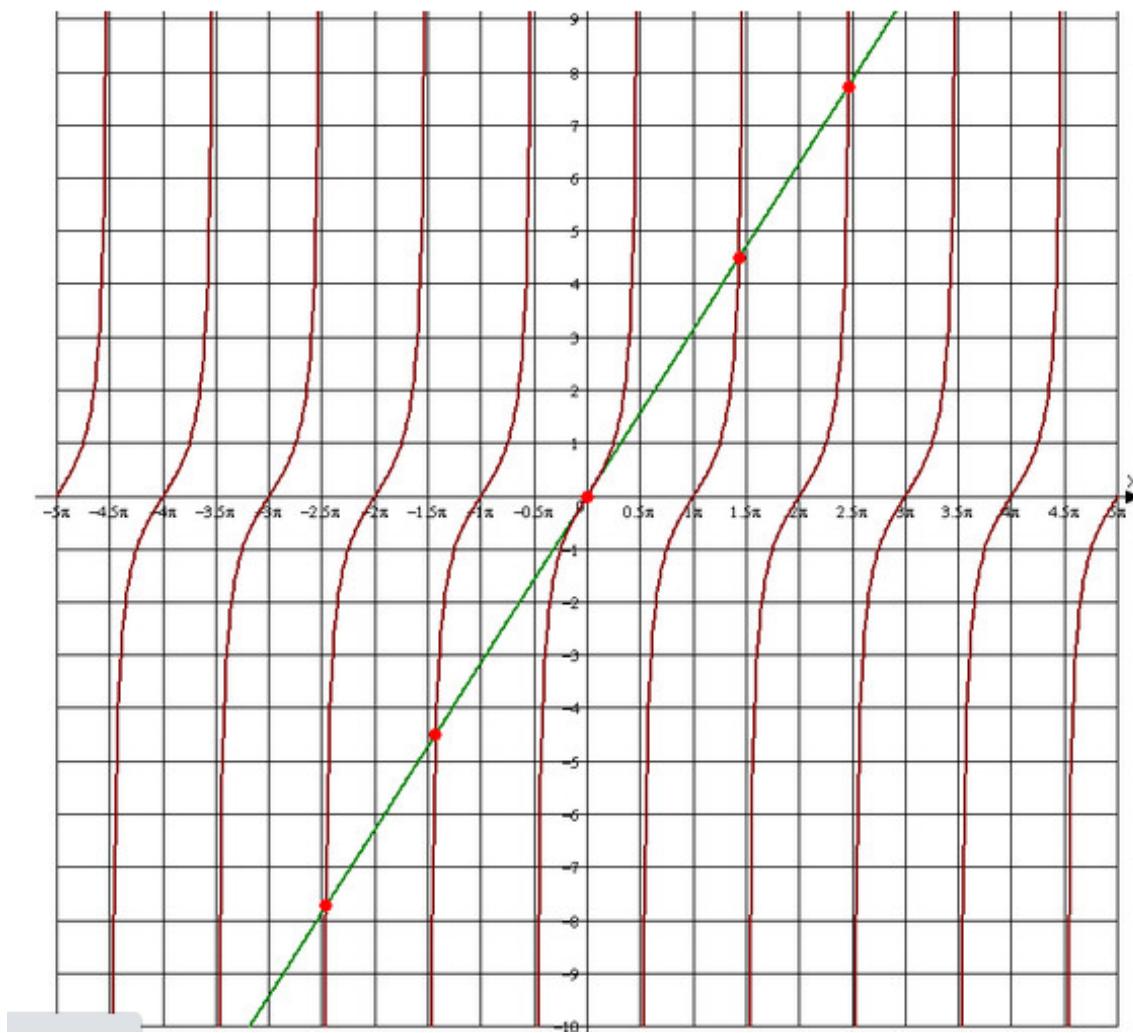


Рисунок 17 – Графическое решение уравнения  $\operatorname{tg} x = x$

1.6. Для электрона, находящегося в основном состоянии в атоме водорода, вычислить среднее значение расстояния  $\bar{r}$

от ядра,  $\bar{r^2}$  и среднеквадратичную флюктуацию координаты  $\sqrt{\langle \Delta r \rangle^2}$ .

## РЕШЕНИЕ

Вероятность нахождения электрона в элементе объема  $dV$  определяется выражением

$$dW = w_r dV,$$

где

$$w_r = |R_{n\ell}(r)|^2.$$

В сферической системе координат  $dV = r^2 \sin\theta d\theta d\phi dr$ . Нас будет интересовать только радиальная часть, поэтому

$$dW(r) = |R_{n\ell}(r)|^2 r^2 dr. \quad (1.49)$$

В основном состоянии  $1s$  радиальная часть волновой функции  $R_{10} = C_0 e^{-\frac{r}{a}}$ ,

где  $a$  – радиус первой боровской орбиты,  $C_0$  – нормировочная константа, которая находится из общего выражения

$$C_{n\ell} = \left( \frac{Z}{na} \right)^{3/2} \sqrt{\frac{4}{n(n-\ell-1)! (n+\ell)!}}.$$

При  $n = 1, \ell = 0$  получаем

$$C_0 = \frac{2}{a^{3/2}}. \quad (1.50)$$

Среднее расстояние  $\bar{r}$  электрона от ядра определяется выражением

$$\bar{r} = \int_0^\infty r dW(r) = \int_0^\infty r |R_{n\ell}(r)|^2 r^2 dr = C_0^2 \int_0^\infty r^3 e^{-\frac{2r}{a}} dr. \quad (1.51)$$

Далее надо трижды применить процедуру вычисления интеграла по частям. Первое интегрирование даёт:

$$u = r^3, \quad du = 3r^2 dr,$$

$$dv = e^{-\frac{2r}{a}} dr, \quad v = -\frac{a}{2} e^{-\frac{2r}{a}},$$

$$\bar{r} = \frac{3a}{2} C_0^2 \int_0^\infty r^3 e^{-\frac{2r}{a}} dr.$$

Вычисляя ещё два раза по частям получившийся интеграл, с учётом нормировочного множителя (1.50) окончательно будем иметь

$$\bar{r} = \frac{3a}{2} = 1,5a. \quad (1.52)$$

Из (1.52) видно, что среднее расстояние электрона от ядра отличается от наиболее вероятного, соответствующего радиусу первой боровской орбиты, в 1,5 раза.

Для нахождения среднего значения квадрата расстояния  $\bar{r^2}$  электрона от ядра в атоме водорода проводим вычисления по аналогии с (1.51):

$$\bar{r^2} = \int_0^\infty r^2 dW(r) = \int_0^\infty r^2 |R_{n\ell}(r)|^2 r^2 dr = C_0^2 \int_0^\infty r^4 e^{-\frac{2r}{a}} dr = 3a^2. \quad (1.53)$$

С учётом (1.52) и (1.53) получаем

$$\overline{(\Delta r)^2} = \bar{r^2} - (\bar{r})^2 = 3a^2 - \left(\frac{3a}{2}\right)^2 = \frac{3}{4}a^2.$$

Отсюда следует выражение для среднеквадратичной флуктуации координаты

$$\sqrt{\overline{(\Delta r)^2}} = \frac{\sqrt{3}}{2} a \approx 0,866a. \quad (1.54)$$

1.7. Исследовать угловое распределение плотности вероятности при движении электрона в центрально-симметричном поле для случая  $\ell = 1$  ( $p$ -состояния).

### РЕШЕНИЕ

Угловая часть волновой функции определяется выражением

$$Y_{\ell,m}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{(2\ell+1)}{4\pi} \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}} P_{\ell}^m(\cos\theta) e^{im\varphi}, \quad (1.55)$$

где

$$P_{\ell}^m(\cos\theta) = P_{\ell}^m(x) = (1-x^2)^{\frac{|\ell|}{2}} \frac{d^{|\ell|}}{dx^{|\ell|}} P_{\ell}(x)$$

— присоединённые полиномы Лежандра. Для стандартного вычисления присоединенного полинома Лежандра степени  $\ell$  порядка  $m$  необходимо найти производную  $m$ -го порядка от полинома (многочлена) Лежандра  $P_{\ell}(\cos\theta) = P_{\ell}(x)$ . В свою очередь, как известно из курса «Методы математической физики», полином Лежандра степени  $\ell$  вычисляется по формуле Родрига:

$$P_{\ell}(x) = \frac{1}{2^{\ell} \ell!} \frac{d^{\ell}}{dx^{\ell}} (x^2 - 1)^{\ell}.$$

Более простой способ вычисления сферических функций заключается в последовательном понижении магнитного квантового числа  $m$  при данном значении орбитального квантового числа  $\ell$  в соответствии с формулами таблицы 4.

Нормировочные множители определяются из условия нормировки. Например, пронормируем состояние  $Y_{1,1}$ . Будем иметь:

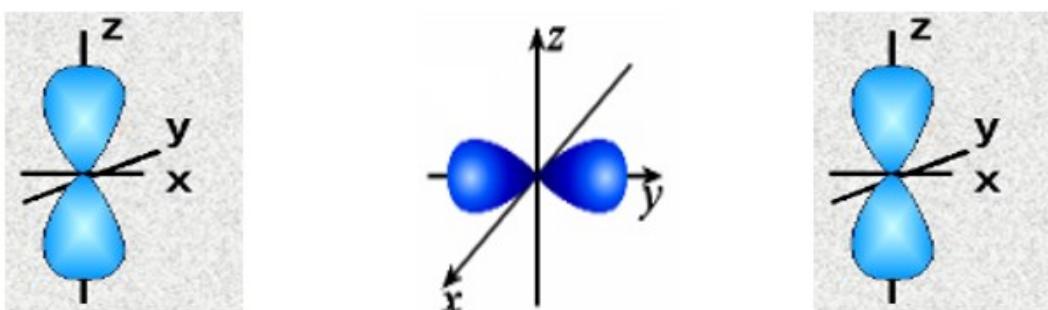
$$\int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} |Y_{1,1}|^2 \sin \theta \, d\theta \, d\varphi = 1,$$

$$2\pi C_{1,1}^2 \int_0^{\pi} (1 - \cos^2 \theta) d\cos \theta = 1.$$

Дальше надо проявить искусство вычисления данного интеграла и убедиться, что

$$C_{1,1} = \sqrt{3/8\pi} ; \quad Y_{1,1} = \sqrt{3/8\pi} \sin \theta e^{i\varphi} ; \quad |Y_{1,1}|^2 = \frac{3}{8\pi} \sin^2 \theta.$$

Угловое распределение плотности вероятности можно наглядно представить с помощью полярных диаграмм, используя полярную систему координат. По радиусу-вектору, проведенному под углом  $\theta$  к оси  $z$ , откладывается величина плотности вероятности. Угол  $\theta$  отсчитывается от оси  $Z$ . Чем больше плотность вероятности, тем дальше оказывается точка от начала координат. Соединив точки, полученные для каждого угла  $\theta$ , будем иметь распределение плотности вероятности по углам. В случае  $p$ -состояния получаются 3 полярные диаграммы (рис. 18):



$$|Y_{1,-1}|^2 = \frac{3}{8\pi} \sin^2 \theta; \quad |Y_{1,0}|^2 = \frac{3}{4\pi} \cos^2 \theta; \quad |Y_{1,1}|^2 = \frac{3}{8\pi} \sin^2 \theta$$

Рисунок 18 – Полярные диаграммы для  $p$ -состояний

Таблица 4 – Сферические функции для  $m = \ell, \ell - 1, \ell - 2$

$m$	$Y_{\ell,m}$
$m = \ell$	$Y_{\ell,\ell}(\theta, \varphi) = C_{\ell,\ell} \sin^\ell \theta e^{i\ell\varphi}$
$m = \ell - 1$	$Y_{\ell,\ell-1}(\theta, \varphi) = C_{\ell,\ell-1} \cos \theta \sin^{\ell-1} \theta e^{i(\ell-1)\varphi}$
$m = \ell - 2$	$Y_{\ell,\ell-2}(\theta, \varphi) = C_{\ell,\ell-2} \sin^{\ell-2} \theta [1 - (2\ell - 1) \cos^2 \theta] e^{i(\ell-2)\varphi}$

Тогда для случая  $\ell = 1$  будем иметь три  $p$ -состояния (таблица 5):

Таблица 5 – Угловое распределение плотности вероятности для  $p$ -состояний

Состояние	$\ell$	$m$	$Y_{\ell,m}$	$ Y_{\ell,m} ^2$	$K$	$K_z$
p	1	1 0 -1	$\sqrt{3/8\pi} \sin \theta e^{i\varphi}$ $\sqrt{3/4\pi} \cos \theta$ $\sqrt{3/8\pi} \sin \theta e^{-i\varphi}$	$3/8\pi \sin^2 \theta$ $3/4\pi \cos^2 \theta$ $3/8\pi \sin^2 \theta$	$\sqrt{2}\hbar$ $\sqrt{2}\hbar$ $\sqrt{2}\hbar$	$\hbar$ 0 $-\hbar$

Мы видим, что распределение вероятности по направлениям совершенно не зависит от азимутального угла  $\varphi$ :

$$|Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)|^2 \neq f(\varphi).$$

В состоянии  $Y_{1,0}$  электрон с наибольшей вероятностью находится на экваторе, а в состояниях  $Y_{1,-1}$  и  $Y_{1,1}$  – на полюсах.

1.8. Линейный гармонический осциллятор с зарядом  $e$  помещен в однородное электрическое поле напряженностью  $\mathcal{E}$ , направленное вдоль оси колебаний. Найти изменение энергии осциллятора, считая электрическое поле слабым.

## РЕШЕНИЕ

В слабом электрическом поле добавку к оператору энергии  $W = -e\mathcal{E}x$ , где  $x$  – координата осциллятора, можно рассматривать как возмущение. Применяя теорию возмущений, имеем для поправки к энергии первого порядка:

$$\begin{aligned} E_n^{(1)} &= \langle \Psi_n^0 | \widehat{W} | \Psi_n^0 \rangle = \\ &= \int_V \Psi_n^{0*} \widehat{W} \Psi_n^0 dV = = -e\mathcal{E} \int_V \Psi_n^{0*} x \Psi_n^0 dV = -e\mathcal{E} x_{nn}. \end{aligned}$$

Ввиду нечётности подынтегральной функции матричный элемент координаты

$$x_{nn} = 0.$$

Поэтому

$$E_n^{(1)} = 0 \quad (1.56)$$

и в первом приближении уровни энергии осциллятора остаются несмешёнными.

Во втором приближении

$$E_n^{(2)} = \sum_{k(\neq n)} \frac{|\langle n^0 | \widehat{W} | k^0 \rangle|^2}{E_n^0 - E_k^0} = \frac{e^2 \mathcal{E}^2}{\hbar \omega} \sum_{k(\neq n)} \frac{|x_{kn}|^2}{n - k}.$$

Для получения окончательного результата необходимо использовать правила отбора: для осциллятора возможны квантовые переходы только между соседними энергетическими уровнями. При этом отличные от нуля матричные элементы определяются выражениями

$$x_{n-1,n} = \langle \Psi_{n-1} | x | \Psi_n \rangle = x_0 \sqrt{\frac{n}{2}},$$

$$x_{n+1,n} = \langle \Psi_{n+1} | x | \Psi_n \rangle = x_0 \sqrt{\frac{n+1}{2}},$$

где

$$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}.$$

Поэтому энергетический спектр ЛГО при наличии электрического поля во втором порядке теории возмущений имеет вид:

$$E_n^{(2)} = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) - \frac{e^2}{2m\omega^2} \mathcal{E}^2. \quad (1.57)$$

Таким образом, во внешнем электрическом поле происходит понижение энергетических уровней ЛГО. Для основного состояния

$$E_{\text{осн}}^{(2)} = \frac{\hbar\omega}{2} - \frac{e^2}{2m\omega^2} \mathcal{E}^2.$$

Нулевые колебания, обусловленные волновыми свойствами микрочастицы, могут быть подавлены электрическим полем, если

$$\frac{\hbar\omega}{2} - \frac{e^2}{2m\omega^2} \mathcal{E}^2 = 0,$$

т.е. если

$$\mathcal{E} = \sqrt{\frac{m\hbar\omega^3}{e^2}}.$$

1.9. Получить гамильтониан обменного взаимодействия для двухэлектронной системы.

## РЕШЕНИЕ

Рассмотрим оператор полного спина двухэлектронной системы:

$$\hat{\vec{S}} = \hat{\vec{S}}_1 + \hat{\vec{S}}_2.$$

Возведём это выражение в квадрат

$$\hat{\vec{S}}^2 = \hat{\vec{S}}_1^2 + \hat{\vec{S}}_2^2 + 2\hat{\vec{S}}_1 \hat{\vec{S}}_2.$$

Очевидно, что

$$2\hat{\vec{S}}_1 \hat{\vec{S}}_2 = \hat{\vec{S}}^2 - \hat{\vec{S}}_1^2 - \hat{\vec{S}}_2^2. \quad (1.58)$$

Учитывая, что оператор  $\hat{\vec{S}}^2$  имеет собственное значение  $\hbar^2 S(S + 1)$ , а каждый из спиновых операторов  $\hat{\vec{S}}_1$  и  $\hat{\vec{S}}_2$  имеют собственное значение  $\frac{3}{4}\hbar^2$ , полагая  $\hbar \equiv 1$ , получим из (1.58)

$$2\hat{\vec{S}}_1 \hat{\vec{S}}_2 = S(S + 1) - \frac{3}{2}.$$

Умножим обе части этого уравнения на  $(-1)$  и добавим по  $(-1/2)$ :

$$-\frac{1}{2} - 2\hat{\vec{S}}_1 \hat{\vec{S}}_2 = 1 - S(S + 1).$$

Затем умножим обе части данного уравнения на обменную энергию  $A$ , получим:

$$\begin{aligned} -\frac{A}{2} - 2A\hat{\vec{S}}_1 \hat{\vec{S}}_2 &= A - AS(S + 1) = \\ &= \begin{cases} A, & \text{если } S = 0 \text{ (синглет)} \\ -A, & \text{если } S = 1 \text{ (триплет).} \end{cases} \end{aligned} \quad (1.59)$$

Таким образом, в правой части выражения (1.59) содержится собственное значение оператора обменного взаимодействия  $\pm A$ . Следовательно, гамильтониан обменного взаимодействия двухэлектронной системы имеет вид

$$\hat{H}_{\text{обм.}} = -\frac{A}{2} - 2A\hat{\vec{S}}_1 \hat{\vec{S}}_2. \quad (1.60)$$

Выражение (1.60) представляет собой обменный гамильтониан Гейзенберга. Обобщение на случай кристалла приводит к обменному гамильтониану Гейзенберга – Дирака

$$\hat{H}_{\text{обм.}} = -\text{const} - 2 \sum_{m \neq n} A_{mn} \hat{\vec{S}}_m \hat{\vec{S}}_n, \quad (1.61)$$

который имеет принципиальное значение для теории магнитоупорядоченных систем. Гамильтониан (1.61) описывает обменное взаимодействие между соседними узлами  $m$  и  $n$  кристаллической решётки.

1.10. Используя правила Хунда, определить полный момент импульса ( $J$ ), суммарный орбитальный момент ( $L$ ), суммарный спиновый момент ( $S$ ) электронной системы атома, основной терм и  $g$ -фактор (множитель Ланде) для иона железа  $\text{Fe}^{2+}$  ( $Z=26$ , электронная конфигурация  $3d^6$ ), относящегося к числу переходных элементов, и иона европия  $\text{Eu}^{2+}$  ( $Z=63$ , электронная конфигурация  $4f^7$ ), относящегося к первой группе редких земель – лантанидов.

## РЕШЕНИЕ

Полный момент количества движения  $\vec{J}$  электронной оболочки атома является векторной суммой результирующего орбитального момента  $\vec{L}$  и результирующего спинового момента  $\vec{S}$ :

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}. \quad (1.62)$$

Последовательность уровней с одинаковой конфигурацией, но различными  $L$  и  $S$  по величине их энергии определяется с помощью эмпирических правил наивысшей мультиплетности, установленных Хундом в 1927 г.

**Первое правило:** наименьшей энергией обладает терм с наибольшим значением суммарного спина  $S$  и наибольшим

(при этом значении  $S$ ) суммарным орбитальным моментом  $L$ . Подробнее его можно сформулировать так:

1а. Суммарное спиновое квантовое число  $S = \sum_k (m_s)_k$  в основном состоянии максимально в пределах, допускаемых принципом Паули.

1б. Суммарное орбитальное квантовое число  $L = \sum_k (m_\ell)_k$  в основном состоянии максимально в пределах, допускаемых правилом 1а.

**Второе правило:** суммарное квантовое число полного момента  $J$  для неполнотью застроенного слоя определяется следующим образом:

2а.  $J = L - S$ , если слой заполнен менее чем наполовину.

2б.  $J = L + S$ , если слой заполнен больше чем наполовину.

Если слой заполнен наполовину ( $L = 0$ ), то  $J = S$ .

Принцип Паули (1925 г.) утверждает, что в состоянии, характеризуемом набором 4 квантовых чисел ( $n, \ell, m, m_s$ ), может находиться не более, чем 1 электрон. Т.е. в атоме нельзя найти два электрона с одним и тем же квантовым «адресом».

Важнейшие характеристики электронной системы атома «зашифрованы» в спектральном терме. Для спектральных термов ( $T$ ) приняты следующие обозначения. В основе символа стоит орбитальное квантовое число  $L$  (таблица 6).

Таблица 6 – Классификация спектральных термов

$L$	0	1	2	3	4	5	6	7
$T$ (терм)	S	P	D	F	G	H	I	K

Слева вверху от символа указывается мультиплетность терма  $(2S + 1)$ , т.е. число состояний мультиплета с данным  $J$ . Справа

внизу указывается значение полного момента  $J$ . При  $(2S + 1) = 1, 2, 3, \dots$  получим синглетные, дублетные, триплетные уровни соответственно. Таким образом, в общем случае обозначение терма следующее:  $^{(2S+1)}T_J$ .

По значениям  $L, S, J$  вычисляются  $g$ -фактор (множитель Ланде, или фактор спектроскопического расщепления) электронной оболочки атома и эффективный магнитный момент атома (эффективное число магнетонов Бора). Множитель Ланде определяется выражением:

$$g_J = 1 + \frac{J(J + 1) + S(S + 1) - L(L + 1)}{2J(J + 1)}. \quad (1.63)$$

В качестве эффективного магнитного момента атома принимается максимальное положительное значение проекции полного магнитного момента на направление магнитного поля:

$$\mu_{z,\text{эфф}} = g_J \cdot J \cdot \mu_B. \quad (1.64)$$

При  $\ell = 0$  (s-состояние) возможно одно значение проекции орбитального момента и один уровень энергии. При  $\ell = 1$  (p-состояние) возможны три проекции орбитального момента, соответствующие значениям  $m = -1, 0, +1$ , и три уровня энергии. При  $\ell = 2$  (d-состояние) имеем  $m = -2, -1, 0, +1, +2$  и 5 уровней. При  $\ell = 3$  (f-состояние) получаем 7 проекций орбитального момента:  $m = -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3$  и 7 уровней и т. д. Низший уровень соответствует максимальному значению  $m$ .

1. Проведём вычисления для иона железа  $Fe^{2+}$ . Чертим пять d-уровней. Пять электронов заполняют все уровни со спинами «вверх», а шестой нужно поместить на нижний уровень, соответствующий максимальному  $\ell = 2$ , со спином «вниз» по принципу Паули (рис. 19).

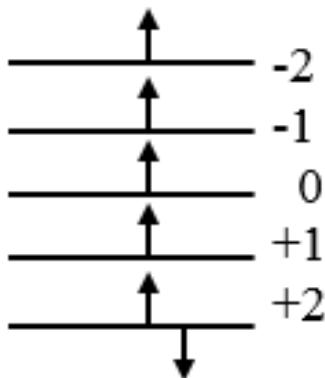


Рисунок 19 – Заполнение уровней для иона железа  $Fe^{2+}$

По правилам Хунда находим:

$$S = 5 \cdot 1/2 - 1/2 = 2; \quad L = 2 + 1 + 0 - 1 - 2 + 2 = 2;$$

$J = 2 + 2 = 4$ . Мультиплетность  $(2S + 1) = 5$ . Поэтому основной терм иона железа  $Fe^{2+}$  будет  $^5D_4$ . По формулам (1.63) и (1.64) определяем  $g$ -фактор и эффективное число магнетонов Бора:  $g_J = 3/2$ ;  $\mu_{z,\text{эфф}}/\mu_B = 6$ .

2. Проведём вычисления для иона европия  $Eu^{2+}$ . Максимальное число электронов, которое может находиться в f-состоянии, равно 14 (см. табл. 6). Следовательно, мы имеем дело с половинным заполнением электронного слоя. В соответствии с правилами Хунда 1а и 1б распределяем 7 имеющихся электронов со спином «вверх» по 7 энергетическим уровням, начиная с уровня, соответствующего наибольшему значению  $\ell = 3$  (рис. 20).

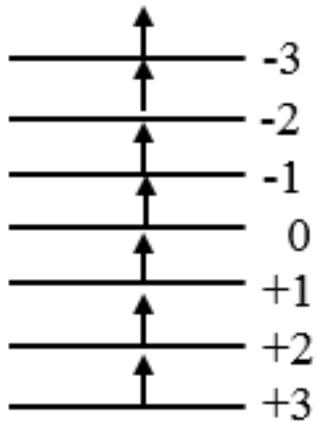


Рисунок 20 – Заполнение уровней для иона европия  $Eu^{2+}$

Для 7 нескомпенсированных спинов «вверх» получаем  $S = 7/2$ . Суммарный орбитальный момент  $L = 3 + 2 + 1 + 0 - -1 - 2 - 3 = 0$ , что и следовало ожидать, поскольку слой 4f заполнен лишь наполовину. Поэтому согласно второму правилу Хунда  $J = S = 7/2$ . Далее определяем мультиплетность терма:  $(2S + 1) = 8$ . Таким образом, основной терм иона  $Eu^{2+}$  следующий:  $^8S_{7/2}$ . По формулам (1.63) и (1.64) вычисляем g-фактор и эффективное число магнетонов Бора:  $g_J = 2$ ;  $\mu_{z,\text{эфф}}/\mu_B = 7$ .

## 5 Примеры решения задач по разделу «Статистическая физика и термодинамика»

Центральным пунктом статистической физики равновесных систем является каноническое распределение Гиббса. Для вычисления равновесных средних значений термодинамических параметров необходимо определить статистический интеграл (интеграл состояний), либо статистическую сумму.

В ряде задач необходимо использовать хорошо известные определённые интегралы (такие как интегралы Пуассона, интеграл ошибок, интегралы квантовой статистики), значения которых приведены в Приложении Б.

2.1. Определить фазовую траекторию линейного гармонического осциллятора (ЛГО) при наличии силы трения, пропорциональной скорости.

### РЕШЕНИЕ

Уравнение движения ЛГО имеет вид

$$m\ddot{q} = -kq - \mu\dot{q},$$

где  $\mu$  – коэффициент трения,  $q$  – обобщённая координата. Это уравнение эквивалентно следующему

$$\ddot{q} + \frac{\mu}{m}\dot{q} + \omega_0^2 q = 0, \quad (2.1)$$

где  $\omega_0$  – частота собственных колебаний ЛГО,  $m$  – его масса. При наличии трения колебания будут затухающими и координата меняется по закону

$$q = A e^{\alpha t}, \quad \alpha < 0. \quad (2.2)$$

Подставляя (2.2) в (2.1), получим

$$\alpha^2 + \frac{\mu}{m}\alpha + \omega_0^2 = 0. \quad (2.3)$$

Решением уравнения (2.3) является

$$\alpha = -\frac{\mu}{2m} \pm i\omega,$$

где

$$\omega = \sqrt{\omega_0^2 - \left(\frac{\mu}{2m}\right)^2}.$$

Тогда (2.2) примет вид

$$q = Ae^{-\frac{\mu}{2m}t} e^{i\omega t},$$

или

$$q = Ae^{-\frac{\mu}{2m}t} (\cos \omega t + i \sin \omega t).$$

Учитывая затухающий характер движения, ограничимся учётом мнимой части:

$$q = Ae^{-\frac{\mu}{2m}t} \sin \omega t. \quad (2.4)$$

Используя (2.4), находим обобщённый импульс ЛГО:

$$\begin{aligned} p &= m\dot{q}, \\ p &= -\frac{\mu}{2}q + m\omega Ae^{-\frac{\mu}{2m}t} \cos \omega t. \end{aligned}$$

После возведения в квадрат обеих частей этого уравнения с учётом (2.4) получим искомое уравнение, определяющее фазовую траекторию ЛГО

$$\frac{q^2}{A^2 e^{-\frac{\mu}{m}t}} + \frac{\left(p + \frac{\mu}{2}q\right)^2}{m^2 \omega^2 A^2 e^{-\frac{\mu}{m}t}} = 1. \quad (2.5)$$

При  $t = 0$  фазовая траектория представляет собой эллипс

$$\frac{q^2}{A^2} + \frac{\left(p + \frac{\mu}{2}q\right)^2}{m^2 \omega^2 A^2} = 1.$$

При  $t \neq 0$  уравнение (2.5) принимает вид

$$\frac{q^2}{a^2} + \frac{\left(p + \frac{\mu}{2}q\right)^2}{b^2} = 1, \quad (2.6)$$

где

$$a^2 = A^2 e^{-\frac{\mu}{m}t}, \quad b^2 = m^2 \omega^2 A^2 e^{-\frac{\mu}{m}t}.$$

Таким образом, фазовая траектория затухающего гармонического осциллятора представляет собой эллиптическую спираль, которая закручивается к началу координат (рис. 21). Это связано с тем, что при наличии трения колебания системы постепенно затухают, и точка, изображающая состояние системы на фазовой плоскости, приближается к положению равновесия (началу координат).

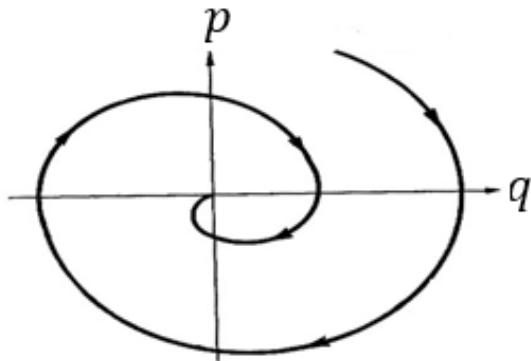


Рисунок 21 – Фазовая траектория затухающего ЛГО

2.2. Учитывая связь энтропии с распределением вероятностей микросостояний

$$S = -k \sum_{i=1}^N W_i \cdot \ell n W_i, \quad (2.7)$$

где  $W_i$  – вероятность  $i$  – го состояния,  $N$  – число всех возможных состояний системы, исследовать её поведение в двухуровневой системе двумя способами:

- 1) применив каноническое распределение Гиббса;
- 2) используя кинетическое уравнение

$$\frac{dW_i}{dt} = \omega(1 - 2W_i), \quad (2.8)$$

где  $\omega$  – частота перескоков частиц между энергетическими уровнями ( $\omega = \text{const}$ ).

### РЕШЕНИЕ

1. В случае системы с двумя энергетическими уровнями  $E_1$  и  $E_2$  (рис. 22) энтропия, согласно (2.7), имеет вид

$$S = -k(W_1 \ln W_1 + W_2 \ln W_2), \quad (2.9)$$

где

$$W_1 = Ae^{-\frac{E_1}{kT}}, W_2 = Ae^{-\frac{E_2}{kT}}, \quad (2.10)$$

в соответствии с каноническим распределением Гиббса. Нормировочная константа  $A$  определяется выражением

$$A = \frac{1}{e^{-\frac{E_1}{kT}} + e^{-\frac{E_2}{kT}}}.$$

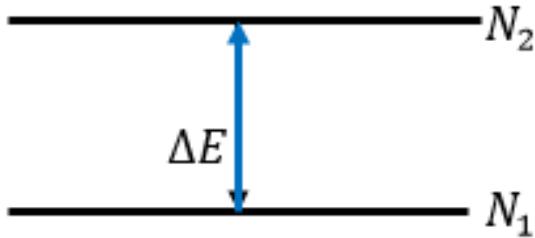


Рисунок 22 – Двухуровневая система

Учитывая, что  $W_1 + W_2 = 1$ , получим из (2.9):

$$S = -k \left( W_1 \ln \frac{W_1}{W_2} + \ln W_2 \right). \quad (2.11)$$

Согласно (2.10),

$$\frac{W_1}{W_2} = e^{\frac{\Delta E}{kT}}. \quad (2.12)$$

Подставляя это отношение в (2.11), получим

$$S = \frac{\Delta E}{T} \frac{1}{e^{\frac{\Delta E}{kT}} + 1} + k \ell n \left( 1 + e^{-\frac{\Delta E}{kT}} \right). \quad (2.13)$$

Из (2.13) следует, что

- а)  $\lim_{T \rightarrow 0} S = k \ell n 1 = 0$ , что согласуется с третьим началом термодинамики в формулировке Планка;
- б)  $\lim_{T \rightarrow \infty} S = k \ell n 2$ , что согласуется с одинаковой населённостью уровней энергии,  $W_1 = W_2 = 1/2$  при высоких температурах. Таким образом, в состоянии статистического равновесия энтропия двухуровневой системы достигает максимального значения  $k \cdot 0,69$ .

2. Теперь используем кинетическое уравнение (2.8), записав его для вероятности нижнего энергетического уровня

$$\frac{dW_1}{dt} = \omega(1 - 2W_1). \quad (2.14)$$

Найдём производную

$$\frac{dS}{dt} = k \frac{dW_1}{dt} \ell n \frac{1 - W_1}{W_1}. \quad (2.15)$$

Подставляя (2.14) в уравнение (2.15), получим

$$\frac{dS}{dt} = k \omega(1 - 2W_1) \ell n \frac{1 - W_1}{W_1}. \quad (2.16)$$

Из (2.16) следует, что:

- а) при  $W_1 > 1/2$  изменение энтропии  $\frac{dS}{dt} > 0$ , т.е. имеет место рост энтропии;
- б) при  $W_1 < 1/2$  снова выполняется неравенство  $\frac{dS}{dt} > 0$ ;

в) при  $W_1 = 1/2 = W_2$ , что соответствует выравниванию вероятностей заполнения энергетических уровней,  $\frac{dS}{dt} = 0$ . Таким образом, энтропия достигает в статистическом равновесии экстремального (максимального) значения.

2.3. Записать классическое каноническое распределение по энергиям для ЛГО и определить его среднюю энергию.

### РЕШЕНИЕ

Каноническое распределение Гиббса определяется выражением

$$dW = \frac{1}{Z} e^{-\frac{E}{kT}} d\Gamma, \quad (2.17)$$

где  $Z$  – интеграл состояний

$$Z = \int_{\Gamma} e^{-\frac{E}{kT}} d\Gamma, \quad (2.18)$$

$d\Gamma$  – элемент фазового объёма. В случае классического ЛГО его энергия

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

Поэтому

$$\begin{aligned} Z &= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{p^2}{2mkT}} dp \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{m\omega^2 x^2}{2kT}} dx = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha p^2} dp \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta x^2} dx, \end{aligned} \quad (2.19)$$

где  $\alpha = 1/2mkT$ ,  $\beta = m\omega^2/2kT$ .

Каждый из интегралов, стоящих в правой части (2.19), представляет собой интеграл Пуассона  $\mathcal{I}_0$  и равен  $\sqrt{\pi/\alpha}$  и  $\sqrt{\pi/\beta}$  соответственно. Поэтому

$$z = \frac{2\pi kT}{\omega}. \quad (2.20)$$

В случае ЛГО

$$d\Gamma = \frac{2\pi}{\omega} dE,$$

поэтому из (2.17) и (2.20) следует

$$dW = \frac{1}{kT} e^{-\frac{E}{kT}} dE.$$

Средняя энергия осциллятора равна

$$\bar{E} = \int_0^\infty E dW = \frac{1}{kT} \int_0^\infty E e^{-\frac{E}{kT}} dE.$$

Сделаем замену переменной, обозначив

$$x = \frac{E}{kT},$$

тогда

$$\bar{E} = kT \int_0^\infty x e^{-x} dx.$$

Вычислим данный интеграл по частям:

$$\begin{aligned} u &= x, & du &= dx, \\ dv &= e^{-x} dx, & v &= -e^{-x}. \end{aligned}$$

Будем иметь

$$\bar{E} = kT \left( -xe^{-x} \Big|_0^\infty + \int_0^\infty e^{-x} dx \right) = kT \cdot 1 = kT.$$

Таким образом, средняя энергия классического ЛГО равна

$$\bar{E} = kT, \quad (2.21)$$

что согласуется с теоремой классической статистики о равномерном распределении энергии по степеням свободы.

2.4. Доказать теорему об относительной флуктуации аддитивной функции состояния: для системы, состоящей из  $N$  независимых частей, относительная флуктуация любой аддитивной функции состояния  $L$  обратно пропорциональна корню из  $N$ , т.е.

$$\delta_L = \frac{1}{\sqrt{N}}. \quad (2.22)$$

## РЕШЕНИЕ

По определению аддитивной величины

$$L = \sum_{k=1}^N L_k,$$

суммирование ведётся по всем независимым частям, входящим в систему. Из закона сложения вероятностей следует:

$$\bar{L} = \sum_{k=1}^N \bar{L}_k. \quad (2.23)$$

Вычислим квадратичную флуктуацию величины  $L$ , т.е.

$$\overline{(\Delta L)^2} = \overline{\left( \Delta \sum_{k=1}^N L_k \right)^2}.$$

Для простоты рассмотрим сначала систему, состоящую из двух независимых частей. Тогда имеем:

$$\overline{[\Delta(L_1 + L_2)]^2} = \overline{(\Delta L_1)^2} + 2\overline{\Delta L_1 \cdot \Delta L_2} + \overline{(\Delta L_2)^2}.$$

Поскольку  $L_1$  и  $L_2$  – независимые величины, среднее от произведения  $(\Delta L_1) \cdot (\Delta L_2)$  равно произведению средних:

$$\overline{\Delta L_1 \cdot \Delta L_2} = \overline{(\Delta L_1)} \cdot \overline{(\Delta L_2)}.$$

Но  $\overline{(\Delta L_1)} = \overline{(\Delta L_2)} = 0$ , поэтому

$$\overline{[\Delta(L_1 + L_2)]^2} = \overline{(\Delta L_1)^2} + \overline{(\Delta L_2)^2}.$$

Обобщая на случай  $N$  независимых частей, входящих в систему, получим

$$\overline{\left( \Delta \sum_{k=1}^N L_k \right)^2} = \sum_{k=1}^N \overline{(\Delta L_k)^2}. \quad (2.24)$$

Очевидно, что значение суммы в правой части (2.24) пропорционально числу слагаемых, т.е.  $N$ , поэтому

$$\overline{\left( \Delta \sum_{k=1}^N L_k \right)^2} \sim N.$$

Среднее значение  $\bar{L}$  также пропорционально числу слагаемых в сумме формулы (2.23), т.е. пропорционально  $N$ . Поэтому относительная флюктуация величины  $L$  равна

$$\delta_L = \frac{\sqrt{\overline{(\Delta L)^2}}}{\bar{L}} = \frac{\sqrt{\overline{(\Delta \sum_{k=1}^N L_k)^2}}}{\sum_{k=1}^N \overline{L_k}} \sim \frac{\sqrt{N}}{N} \sim \frac{1}{\sqrt{N}}.$$

Теорема доказана.

Поскольку число частиц в макроскопической системе обычно очень велико (порядка  $6 \cdot 10^{23}$ ), относительная флюктуация любой аддитивной величины практически оказывается равной нулю. Это означает, что все аддитивные величины имеют значения, весьма близкие к средним. Средние значения различных величин, вычисленные на основе законов статистической физики, с очень большой точностью совпадают с их истинными значениями.

2.5. Определить число частиц  $\Delta N/N$ , скорости которых заключены в интервале от нуля до наиболее вероятной скорости.

### РЕШЕНИЕ

Число частиц,  $\Delta N/N$ , скорости которых не превышают наиболее вероятное значение  $v_B$ , определяется следующим образом:

$$\Delta N/N = \int_0^{v_B} f(v) dv = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{m}{2kT} \right)^{3/2} \int_0^{v_B} v^2 e^{-\frac{mv^2}{2kT}} dv. \quad (2.25)$$

Введём следующее обозначение

$$\alpha = \frac{m}{2kT},$$

где  $m$  — масса частицы идеального газа, подчиняющегося распределению Максвелла. При этом формула (2.25) принимает вид

$$\Delta N/N = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \alpha^{3/2} \int_0^{v_B} v^2 e^{-\alpha v^2} dv. \quad (2.26)$$

Учитывая, что  $v_B = \sqrt{\frac{2kT}{m}} = \frac{1}{\sqrt{\alpha}}$ , удобно сделать замену переменной:  $x = \sqrt{\alpha}v$ . Тогда (2.18) примет вид

$$\Delta N/N = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \int_0^1 e^{-x^2} x^2 dx. \quad (2.27)$$

Учитывая, что  $d(e^{-x^2}) = -2xe^{-x^2} dx$ , интеграл в правой части (2.27) вычислим по частям:

$$\begin{aligned} u &= -\frac{x}{2}, & du &= -\frac{1}{2} dx, \\ dv &= d(e^{-x^2}), & v &= e^{-x^2}. \end{aligned}$$

Будем иметь:

$$\Delta N/N = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \left( -\frac{x}{2} e^{-x^2} \Big|_0^1 + \frac{1}{2} \int_0^1 e^{-x^2} dx \right),$$

$$\begin{aligned} \Delta N/N &= -\frac{2}{\sqrt{\pi}} e^{-1} + \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^1 e^{-x^2} dx = -0,418 + \operatorname{erf}(1) = \\ &= -0,418 + 0,843, \end{aligned}$$

$$\Delta N/N \approx 0,43, \text{ т. е. } 43\%.$$

В процессе вычислений был использован интеграл ошибок

$$\operatorname{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-x^2} dx = 0,843 \text{ при } z = 1.$$

2.6. Найти среднюю потенциальную энергию молекулы идеального газа, находящегося в центрифуге радиуса  $R$ , вращающейся с постоянной угловой скоростью  $\omega$ .

### РЕШЕНИЕ

Каждая частица идеального газа во вращающемся цилиндре испытывает действие центробежной силы инерции

$$F = m\omega^2 r,$$

где  $r$  – расстояние молекулы от оси вращения. Потенциальная энергия частицы в таком силовом поле имеет вид

$$U = -\frac{m\omega^2 r^2}{2}.$$

Согласно распределению Больцмана, вероятность обнаружить молекулу в точке с цилиндрическими координатами  $r, \varphi, z$  равна

$$dW(r, \varphi, z) = Ae^{-\frac{U}{kT}}dV = Ae^{\frac{m\omega^2r^2}{2kT}}rdrd\varphi dz.$$

Отсюда получим функцию распределения по  $r$ :

$$dW(r) = A_1 e^{\frac{m\omega^2r^2}{2kT}}rdr,$$

где коэффициент  $A_1$  находится из условия нормировки

$$\int_0^R dW(r) = 1,$$

$$A_1 = \left( \int_0^R e^{\frac{m\omega^2r^2}{2kT}}rdr \right)^{-1} = \frac{m\omega^2}{kT} \frac{1}{\left( e^{\frac{m\omega^2R^2}{2kT}} - 1 \right)}.$$

Следовательно,

$$\bar{U} = \int_0^R U dW(r) = -\frac{m\omega^2}{kT} \frac{1}{\left( e^{\frac{m\omega^2R^2}{2kT}} - 1 \right)} \int_0^R \frac{m\omega^2r^2}{2} e^{\frac{m\omega^2r^2}{2kT}}rdr,$$

$$\bar{U} = -\frac{m^2\omega^4}{2kT} \frac{1}{\left( e^{\frac{m\omega^2R^2}{2kT}} - 1 \right)} \int_0^R r^3 e^{\frac{m\omega^2r^2}{2kT}}dr. \quad (2.28)$$

Преобразуем интеграл в правой части (2.28):

$$\int_0^R r^3 e^{\frac{m\omega^2r^2}{2kT}}dr = \frac{2kT}{m\omega^2} \int_0^R \frac{m\omega^2r^2}{2kT} e^{\frac{m\omega^2r^2}{2kT}} \frac{kT}{m\omega^2} d\left(\frac{m\omega^2r^2}{2kT}\right).$$

Введём обозначение

$$\chi = \frac{m\omega^2 r^2}{2kT}.$$

Тогда

$$\int_0^R r^3 e^{\frac{m\omega^2 r^2}{2kT}} dr = 2 \left( \frac{kT}{m\omega^2} \right)^2 \int_0^{\frac{m\omega^2 R^2}{2kT}} x e^x dx. \quad (2.29)$$

Интеграл в (2.29) вычисляется по частям:

$$\begin{aligned} u &= x, \quad du = dx, \\ dv &= e^x dx, \quad v = e^x. \end{aligned}$$

В результате будем иметь

$$\begin{aligned} &2 \left( \frac{kT}{m\omega^2} \right)^2 \int_0^{\frac{m\omega^2 R^2}{2kT}} x e^x dx = \\ &= 2 \left( \frac{kT}{m\omega^2} \right)^2 \left[ \frac{m\omega^2 R^2}{2kT} e^{\frac{m\omega^2 R^2}{2kT}} - \left( e^{\frac{m\omega^2 R^2}{2kT}} - 1 \right) \right]. \end{aligned}$$

Подставляя полученный результат в (2.28), получим

$$\bar{U} = -kT \frac{1 + \left( \frac{m\omega^2 R^2}{2kT} - 1 \right) e^{\frac{m\omega^2 R^2}{2kT}}}{\left( e^{\frac{m\omega^2 R^2}{2kT}} - 1 \right)}. \quad (2.30)$$

2.7. Вычислить статистический интеграл классического идеального газа, содержащего  $N$  частиц. Используя связь со статистическим интегралом, найти следующие термодинамические функции: свободная энергия, давление, энтропия, внутренняя энергия, химический потенциал.

## РЕШЕНИЕ

1. Статистический интеграл имеет вид

$$z = \int_{\Gamma} e^{-\frac{\mathcal{H}}{kT}} d\Gamma,$$

где  $d\Gamma$  – элемент фазового объёма,  $\mathcal{H}$  – функция Гамильтона (полная механическая энергия системы). В случае классического идеального газа из  $N$  частиц с  $s$  степенями свободы ( $s = 3N$ ):

$$z = \int_p \exp \left\{ - \sum_{\alpha=1}^{3N} \frac{p_{\alpha}^2}{2mkT} \right\} dp_1 dp_2 \dots dp_{3N} \int_q dq_1 dq_2 \dots dq_{3N},$$

или

$$z = V^N \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left\{ - \sum_{\alpha=1}^{3N} \frac{p_{\alpha}^2}{2mkT} \right\} dp_1 \right]^{3N}. \quad (2.31)$$

Обозначив

$$\frac{1}{2mkT} = \beta,$$

приходим к интегралу Пуассона

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\beta}}.$$

Поэтому из (2.31) следует

$$z_{\text{ид}} = (2\pi mkT)^{\frac{3N}{2}} V^N. \quad (2.32)$$

В квазиклассическом случае

$$z_{\text{ид}} = \frac{1}{N! h^{3N}} (2\pi mkT)^{\frac{3N}{2}} V^N,$$

где множитель  $N!$  учитывает принцип неразличимости одинаковых частиц, а множитель  $h^{3N}$  есть элементарный объём в фазовом пространстве координат и импульсов.

2. Свободная энергия  $F$  связана со статистическим интегралом равенством

$$F = -kT\ell nz.$$

Поэтому

$$F = -NkT \left[ \frac{3}{2} \ell n(2\pi mkT) + \ell nV. \right] \quad (2.33)$$

3. Давление газа связано со свободной энергией равенством

$$p = - \left( \frac{\partial F}{\partial V} \right)_T,$$

поэтому, учитывая, что

$$\frac{\partial \ell nz}{\partial V} = \frac{1}{z} \frac{\partial z}{\partial V},$$

получим

$$p = \frac{kT}{z} \left( \frac{\partial z}{\partial V} \right)_T.$$

Согласно (2.33)

$$p = \frac{NkT}{V}, \quad (2.34)$$

откуда следует уравнение состояния идеального классического газа:

$$pV = NkT.$$

Для 1 моля, когда  $N = N_A$ ,

$$pV = RT.$$

4. Энтропия  $S$  связана с интегралом состояний равенством

$$S = - \left( \frac{\partial F}{\partial T} \right)_V = k \frac{\partial}{\partial T} (T \ell n z).$$

С учётом (2.33) получаем следующее выражение:

$$S = \frac{3}{2} Nk \ell n T + Nk \ell n V + S_0, \quad (2.35)$$

где

$$S_0 = \frac{3}{2} Nk [\ell n(2\pi mk) + 1]. \quad (2.36)$$

Для 1 моля

$$S = C_V \ell n T + R \ell n V + S_0, \quad (2.37)$$

где  $C_V = 3/2 N_A k$  – молярная теплоёмкость при постоянном объёме.

Заметим, что такое же выражение (2.37) для энтропии получается и термодинамическим методом из основного термодинамического тождества

$$TdS = dU + pdV.$$

Преимущество статистического расчёта состоит в том, что он позволяет вскрыть микроструктуру постоянной  $S_0$  (2.36).

5. Согласно определению, внутренняя энергия

$$U = \bar{E} = \int_{\Gamma} E \rho d\Gamma = \frac{1}{z} \int_{\Gamma} E e^{-\frac{E}{kT}} d\Gamma.$$

Введём обозначение:  $\beta = 1/kT$ .

Тогда

$$\bar{E} = \frac{1}{z} \int_{\Gamma} E e^{-\beta E} d\Gamma = \frac{1}{z} \left( -\frac{\partial z}{\partial \beta} \right) = -\frac{\partial \ell n z}{\partial \beta},$$

или

$$\bar{E} = kT^2 \left( \frac{\partial \ell n z}{\partial T} \right)_V = kT^2 \frac{1}{z} \frac{\partial z}{\partial T}. \quad (2.38)$$

С учётом (2.32) получим:

$$\bar{E} = \frac{3}{2} N k T, \quad (2.39)$$

что согласуется с теоремой о равнораспределении энергии и приводит к статистическому толкованию температуры как меры средней кинетической энергии частиц идеального газа.

Для 1 моля идеального газа

$$\bar{E} = \frac{3}{2} R T.$$

6. Для получения выражения для химического потенциала  $\mu$  используем соотношение

$$e^{-\frac{\mu}{kT}} = \frac{z}{N}.$$

Прологарифмировав его, находим

$$\mu = kT \ell n \frac{N}{(2\pi m k T)^{\frac{3N}{2}} V^N}. \quad (2.40)$$

2.8. В двигателе внутреннего сгорания, работающем по циклу Отто (рис.23), горючая смесь, вошедшая в цилиндр, адиабатно сжимается (1-2); воспламенённая искрой, изохорно сгорает (2-3); адиабатно расширяется (3-4) и выбрасывается в атмосферу (4-1). Работа производится не за счёт теплоты извне,

а за счёт внутренней энергии рабочего вещества (горючей смеси). Определить к.п.д. двигателя и выразить его сначала через  $T_1, T_2, T_3, T_4$ , а затем через параметр цикла  $\varepsilon = \frac{V_1}{V_2}$  (степень сжатия).

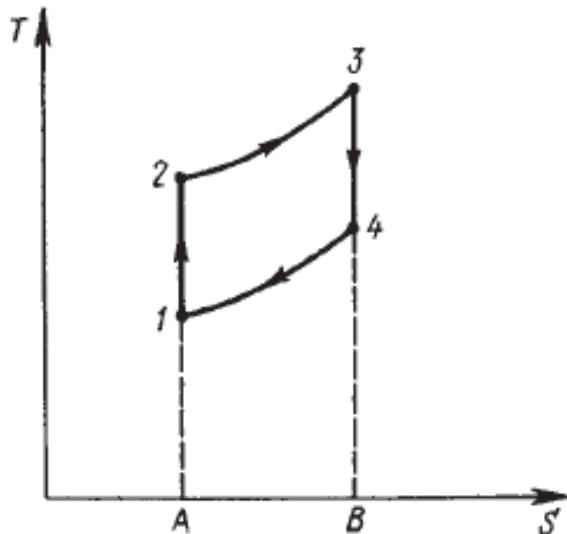


Рисунок 23 – цикл Отто

### РЕШЕНИЕ

На изоэнтропийных ( $S = \text{const}$ ) участках цикла 1-2 и 3-4  $\delta Q_{12} = \delta Q_{34} = 0$ .

На изохорных ( $V = \text{const}$ ) участках 2-3 и 4-1

$$\delta Q_{23} = C_V dT + pdV = C_V dT,$$

$$\delta Q_{41} = C_V dT + pdV = C_V dT.$$

Поэтому

$$Q_1 = Q_{23} = C_V(T_3 - T_2),$$

$$Q_2 = Q_{41} = C_V(T_1 - T_4) = -C_V(T_4 - T_1).$$

К.п.д. цикла

$$\eta = \frac{Q_{23} - |Q_{41}|}{Q_{23}} = 1 - \frac{T_4 - T_1}{T_3 - T_2}. \quad (2.41)$$

Выразим  $\eta$  через параметр цикла  $\varepsilon$ . Используем уравнение адиабаты

$$TV^{\gamma-1} = \text{const.}$$

Тогда будем иметь

$$T_2 = T_1 \varepsilon^{\gamma-1}, \quad T_3 = T_4 \varepsilon^{\gamma-1}. \quad (2.42)$$

Подставляя (2.42) в (2.41), получим

$$\eta = 1 - \frac{T_4 - T_1}{(T_4 - T_1)\varepsilon^{\gamma-1}},$$

или окончательно

$$\eta = 1 - \frac{1}{\varepsilon^{\gamma-1}}. \quad (2.43)$$

2.9. Концентрация электронов в серебре  $n = 5,85 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$ . Определить температуру вырождения электронного газа. Является ли газ с такой концентрацией вырожденным при комнатной температуре?

### РЕШЕНИЕ

Газ называется вырожденным (или квантовым), если его температура много меньше температуры вырождения данного газа:

$$T \ll T_0, \quad (2.44)$$

где

$$T_0 = \frac{\hbar^2}{2\pi mk} n^{2/3}. \quad (2.45)$$

Из этих формул видно, что условия вырождения выполняются при достаточно низкой температуре и высокой концентрации  $n$  частиц.

Проведём оценку  $T_0$  для серебра:

$$T_0 = \frac{(6,62 \cdot 10^{-34})^2}{2 \cdot 3,14 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 1.38 \cdot 10^{-23}} (5,85 \cdot 10^{28})^{2/3} \approx \\ \approx 6,39 \cdot 10^4 K. \quad (2.46)$$

Согласно условию (2.44), электронный газ в серебре при комнатной температуре  $\sim 300$  К является сильно вырожденным газом.

2.10. Показать, что давление и энтропия являются инвариантами преобразований Лоренца (не меняются при переходе от одной инерциальной системы отсчёта в другую).

### РЕШЕНИЕ

1. Из специальной теории относительности известно, что при переходе от одной ИСО к другой продольная составляющая силы не меняется, а поперечные составляющие уменьшаются. Закон преобразования силы, действующей на поверхность тела, движущегося вдоль оси  $x$ , следующий:

$$F_x = F'_x, \quad F_y = F'_y \sqrt{1 - \beta^2}, \quad F_z = F'_z \sqrt{1 - \beta^2},$$

где  $\beta = v/c$ .

Давление определяется как отношение силы, действующей перпендикулярно поверхности, к площади этой поверхности. Так как поверхность, перпендикулярная оси  $x$  не испытывает сокращения Лоренца, а поверхности, перпендикулярные двум другим осям, сокращаются в отношении  $\sqrt{1 - \beta^2}$ , то  $p = p'$ .

2. Согласно принципу Больцмана (статистическое выражение для энтропии)

$$S = k \ell n W,$$

энтропия макросостояния системы определяется числом реализующих его микросостояний. Но число состояний и число частиц  $N$  не зависит от скорости тела  $v$  и, следовательно, не меняется при преобразованиях Лоренца. Таким образом, энтропия является инвариантом преобразований Лоренца.

## **6 Структура билета курсового экзамена по дисциплине «Теоретическая физика» и требования к оцениванию ответов студентов**

В восьмом семестре по учебному плану предусмотрен экзамен по дисциплине «Теоретическая физика». На экзамен выносится материал, изучавшийся на разных видах занятий: на лекциях, практических занятиях, лабораторных занятиях. Часть вопросов, выносимых на экзамен, студенты бакалавриата изучают самостоятельно, что предусмотрено ФГОС ВО и отражено в рабочей программе дисциплины «Теоретическая физика».

Цель экзамена – выявить качество знаний студентов по теоретическим вопросам физики и умения применять свои знания в решении физических задач.

Экзаменационные билеты содержат материал, изучаемый на протяжении двух семестров, т.е. годовой курс, включающий разделы «Нерелятивистская квантовая механика» и «Статистическая физика и термодинамика».

По другим разделам курса ТФ (классическая механика, классическая (максвелловская) электродинамика, специальная теория относительности, физика твёрдого тела, физика атомного ядра и элементарных частиц) предусмотрен зачёт.

Каждый билет состоит из трех вопросов. Первые два вопроса – теоретические (первый – по квантовой механике, второй – по статистической физике и термодинамике) Третий вопрос – задача по одному из этих разделов.

Поскольку в 7 семестре предусмотрен зачёт по разделу «Квантовая механика» как форма промежуточного контроля

знаний, первый теоретический вопрос экзаменационного билета связан исключительно с принципиальными положениями квантовой механики. Такие вопросы, как экспериментальные основы квантовой механики, развитие квантовой теории от работ М. Планка (1900 г.) до первой квантовой теории атома Н. Бора (1913 г.), эпоха «старой квантовой теории» с 1913 по 1922 гг., доказательство теорем, входящих в математический аппарат квантовой механики, не включаются в содержание экзаменационного билета. Основное содержание первого вопроса отражает достижения в период «золотого века теоретической физики» (1924-1927 гг.), в рамках которого были созданы матричная квантовая механика В. Гейзенберга (1925 г.), волновая механика Э. Шрёдингера (1926 г.) и векторная формулировка квантовой механики П. Дирака (1926-27 гг.).

При ответе на первый вопрос студент должен продемонстрировать:

- знание фундаментальных идей, понятий, принципов квантовой механики;
- умение последовательно и доказательно излагать обсуждаемый вопрос с применением необходимого математического аппарата;
- понимание прикладных аспектов квантовой механики, роли первой и второй квантовых революций (в то время как первая квантовая революция привела к созданию технологий, основанных на управлении коллективными квантовыми явлениями; вторая квантовая революция позволяет управлять сложными квантовыми системами на уровне отдельных частиц – атомов, фотонов, электронов – и оперирует такими понятиями, как запутанные квантовые состояния, квантовая телепортация, квантовая криптография, квантовые вычисления, квантовая сенсорика).

Второй вопрос экзаменационного билета относится к классической и квантовой статистике идеальных систем и к обоснованию законов феноменологической термодинамики на основе статистической физики. Студенты должны продемонстрировать знание основных понятий и принципов статистической физики, законов статистической термодинамики, метода термодинамических функций, умение применять статистическую физику для изучения свойств газов, знать основы теории флуктуаций и термодинамики неравновесных процессов.

Ответ на третий вопрос должен содержать развернутое решение задачи с обоснованием физического смысла получаемых результатов.

Оценка за ответ на курсовом экзамене по дисциплине «Теоретическая физика» будет формироваться как результирующая следующих составляющих:

- 1) оценки, полученной за ответ по первому теоретическому вопросу билета;
- 2) оценки, полученной за ответ по второму теоретическому вопросу билета;
- 3) оценки, полученной за решение задачи;
- 4) рейтинга текущей работы на протяжении изучения курса.

Требования к оцениванию ответа на теоретические вопросы билета.

Оценка **«отлично»** ставится, если:

- даётся обстоятельный ответ, содержащий вывод основных формул и соотношений с объяснением их физического смысла;

- студент демонстрирует глубину понимания материала, усвоение основных идей, принципов, понятий, расчётных методов;
- приводятся правильные ответы на дополнительные вопросы.

Оценка **«хорошо»** ставится, если:

- при ответе допущены некоторые неточности;
- имеются затруднения в выяснении физического смысла обсуждаемых результатов;
- возникают затруднения при ответе на некоторые дополнительные вопросы, но в целом демонстрируется достаточно хорошее понимание основных вопросов курса.

Оценка **«удовлетворительно»** ставится, если:

- допущены грубые ошибки, свидетельствующие о недопонимании материала;
- студент не дает правильных ответов на дополнительные вопросы.

Оценка **«неудовлетворительно»** ставится, если:

- студент затрудняется объяснить написанное;
- студент демонстрирует незнание основных формул и принципиальных положений;
- отсутствует ответ на теоретический вопрос билета.

Требования к оцениванию решения задачи, представленной в билете.

Оценка **«отлично»** ставится, если студент:

- решил задачу правильно;
- дал объяснение физического смысла полученных результатов;

- провел аргументированно, на основе знаний теоретического материала вывод необходимых формул;
- знает единицы измерения величин.

Оценка «**хорошо**» ставится, если студент решил задачу в целом правильно, но:

- демонстрирует затруднения в объяснении физического смысла полученных результатов;
- обнаруживает поверхностное владение терминологическим аппаратом;
- демонстрирует незнание единиц измерения величин.

Оценка «**удовлетворительно**» ставится, если студент:

- решил задачу с ошибками;
- обнаружил слабое владение терминологическим аппаратом;
- провел вывод формулы для расчета с грубыми ошибками в аргументации;
- обнаружил незнание единиц измерения величин.

Оценка «**неудовлетворительно**» ставится, если:

- задача решена с серьёзными ошибками;
- задача не решена.

Подготовка к экзамену по теоретической физике предполагает систематическую работу над курсом в течение года. При изучении теоретической физики очень важно посещать лекции, подробно записывать, а затем анализировать излагаемый на них материал. Это обусловлено тем, что в учебных пособиях не содержатся детальные математические преобразования. Стандартный метод изложения сводится, как правило, к замечаниям типа: «как нетрудно показать», «после несложных преобразований получим» и т.д. Однако за этими так называемыми «несложными

преобразованиями» обычно скрываются несколько страниц математических преобразований, прежде чем получится требуемый результат! Эту специфику учебных пособий необходимо иметь в виду. В процессе чтения лекций материал излагается доказательно, подробно, со всеми промежуточными выкладками. Присутствующий на лекции студент становится соучастником процесса получения всех основных физических результатов. Только таким способом, постигая шаг за шагом весьма непростые вопросы, можно понять логику дисциплины и её основное содержание.

В процессе самостоятельной работы над курсом лекций необходимо уделить внимание основным понятиям, идеям, принципам и расчётным методам; научиться самостоятельно выводить все главные формулы и уравнения; развивать умение анализировать физический смысл получаемых результатов. При подготовке к экзамену необходимо ориентироваться на конспекты лекций, материал практических занятий, а также на рекомендуемую литературу.

## Заключение

При изучении квантовой механики и статистической термодинамики открываются возможности уникального языка теоретической физики, посредством которого удаётся последовательно и элегантно излагать основные закономерности поведения как отдельных микрообъектов, так и совокупности большого числа частиц. Два этих раздела курса теоретической физики имеют решающее значение для понимания современной физической картины мира. Они являются фундаментом для последующего изучения «синтетических» дисциплин, таких как физика твёрдого тела (электронная теория вещества) или физика атомного ядра и элементарных частиц. Методы квантовой механики и статистической физики пронизывают не только все основные разделы современной физики, но и находят широкое применение в других естественно-научных областях (биологии, медицине, информатике и т.д.).

Теоретические положения и основные задачи курса нерелятивистской квантовой механики рассмотрены в данном учебном пособии с учётом трёх формулировок квантовой механики: матричной квантовой механики Гейзенберга, волновой механики Шрёдингера и векторной формулировки Дирака.

Лейтмотивом раздела «Статистическая термодинамика» является органичное объединение феноменологического и микроскопического подходов к описанию основных понятий и законов. При этом наряду с классической статистической физикой значительное место отведено вопросам квантовой статистики. Квантово-механическое описание макроскопических систем

даёт возможность достаточно ясно определить понятия микросостояния, статистического распределения и энтропии системы.

Центральным пунктом статистической физики равновесных систем является каноническое распределение Гиббса. Поэтому значительное количество задач связано с приложениями распределения Гиббса.

# Список литературы

## Квантовая механика

1. **Блохинцев, Д. И.** Основы квантовой механики: учебное пособие / Д. И. Блохинцев. – 7-е изд., стер. – Санкт-Петербург : Лань, 2022. – 672 с. – ISBN 978-5-8114-0554-1. – Текст : непосредственный.

2. **Байков, Ю. А.** Нерелятивистская квантовая механика : учебное пособие / Ю. А. Байков, В. М. Кузнецов, Н. И. Петров. – Москва : Лаборатория знаний, 2025. – 318 с. – ISBN 978-5-93208-919-4. – Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. – URL: <https://e.lanbook.com/book/451544> (дата обращения: 23.12.2025). – Режим доступа: для авториз. пользователей.

3. **Давыдов, А. С.** Квантовая механика / А. С. Давыдов. – Санкт-Петербург : БХВ-Петербург, 2010. – 704 с. – ISBN 978-5-9775-0548-2. – Текст : непосредственный.

4. **Демидович, Б. П.** Математические основы квантовой механики: учеб. пособие / Б. П. Демидович. – Санкт-Петербург : Лань, 2024. – 200 с. – ISBN 978-5-507-50047-5. – Текст : непосредственный.

5. **Дирак, П. А. М.** Принципы квантовой механики / П. А. М. Дирак. – Москва : Наука, 1979. – 480 с. – Текст : непосредственный.

6. **Ландау, Л. Д.** Теоретическая физика. В 10 томах. Том 3. Квантовая механика. Нерелятивистская теория / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. – Москва : Физматлит, 2016. – 800 с. – ISBN: 978-5-9221-0530-9. – Текст : непосредственный.

7. **Левич, В. Г.** Квантовая механика / В. Г. Левич, Ю. А. Вдовин, В. А. Мямлин. – Москва : Наука, 1971. – 936 с. – Текст : непосредственный.

8. **Мултановский, В. В.** Курс теоретической физики. Квантовая механика / В. В. Мултановский, А. С. Василевский. – Москва : Дрофа, 2007. – 400 с. – ISBN: 978-5-358-01306-3. – Текст : непосредственный.

9. **Свирская, Л. М.** Квантовая механика. Курс лекций в 2 ч. Часть 1 / Л. М. Свирская. – Челябинск : Изд-во ЮУрГГПУ, 2018. – 270 с. – ISBN 978-5-91155-062-2; 978-5-91155-063-9. – Текст : электронный // электронная библиотечная система ЮУрГГПУ. – URL: <http://elib.csru.ru/xmlui/handle/123456789/4885> (дата обращения: 18.12.2025).

10. **Свирская, Л. М.** Квантовая механика. Курс лекций в 2 ч. Часть 2 / Л. М. Свирская. – Челябинск : Изд-во ЮУрГГПУ, 2018. – 184 с. – ISBN 978-5-91155-062-2; 978-5-91155-063-9. Текст : электронный // электронная библиотечная система ЮУрГГПУ. – <http://elib.csru.ru/xmlui/handle/123456789/4884>. (дата обращения: 18.12.2025).

11. **Шпольский, Э. В.** Атомная физика : учебник : в 2 томах / Э. В. Шпольский. – 6-е изд, стер. – Санкт-Петербург : Лань, 2022 – Том 2 : Основы квантовой механики и строение электронной оболочки атома – 2022. – 448 с. – ISBN 978-5-8114-1006-4. – Текст: электронный // Лань : электронно-библиотечная система. – URL: <https://e.lanbook.com/book/210401> (дата обращения: 23.12.2025). – Режим доступа: для авториз. пользователей.

## **Статистическая физика и термодинамика**

12. **Базаров, И. П.** Термодинамика / И. П. Базаров. – Санкт-Петербург : Лань, 2010. – 384 с. – ISBN: 978-5-8114-1003-3. – Текст : непосредственный.

13. **Базаров, И. П.** Термодинамика и статистическая физика / И. П. Базаров, Э. В. Геворкян, П. Н. Николаев. – Москва : МГУ, 1986. – 310 с. – Текст : непосредственный.

14. **Василевский, А. С.** Курс теоретической физики в 4 томах. Том 4. Статистическая физика и термодинамика. / А. С. Василевский, В. В. Мултановский – Москва : Просвещение, 1985. – 256 с. – Текст : непосредственный.
15. **Ландау, Л. Д.** Теоретическая физика. В 10 томах. Том 5. Статистическая физика. Часть 1 / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. – Москва : Физматлит, 2012. – 616 с. – ISBN 978-5-9221-1510-0. – Текст : непосредственный.
16. **Левич, В. Г.** Курс теоретической физики в 2 томах. Том 1 / В. Г. Левич. – Москва : Наука, 1969. – 912 с. – Текст : непосредственный.
17. **Ноздрёв, В. Ф.** Курс статистической физики / В. Ф. Ноздрёв, А. С. Сенкевич. – Москва : Высшая школа, 1969. – 288 с. – Текст : непосредственный.
18. **Садовский, М. В.** Лекции по статистической физике / М. В. Садовский. – Москва; Ижевск : РХД, 2003. – 336 с. – ISBN: 5-93972-240-7. – Текст : непосредственный.
19. **Серова, Ф. Г.** Сборник задач по теоретической физике. Квантовая механика, статистическая физика / Ф. Г. Серова, А. А. Янкина. – Москва : Просвещение, 1979. – 192 с. – Текст : непосредственный.

## **Приложение А (справочное)**

### **Фундаментальные физические константы, используемые в квантовой механике и статистической термодинамике**

В теоретической физике широко применяется гауссова система единиц, где основными механическими величинами являются сантиметр, грамм, секунда. Для квантовой механики система СИ является неудобной и менее употребительной. В таблице 7 приведены фундаментальные физические постоянные, используемые в квантовой механике, в гауссовой системе единиц.

Таблица А.1

Названия	Значения
Постоянная Планка (квант действия)	$h = 6,62 \cdot 10^{-27}$ эрг · с
Приведённая постоянная Планка	$\hbar = h/2\pi = 1,054 \cdot 10^{-27}$ эрг · с
Скорость света в вакууме	$c = 3 \cdot 10^{10}$ см/с
Заряд электрона	$e = 4,8 \cdot 10^{-10}$ СГСЭ
Масса покоя электрона	$m_e = 9,1 \cdot 10^{-28}$ г
Масса покоя протона	$m_p = 1,67 \cdot 10^{-24}$ г
Комptonовская длина волны	$\Lambda = \frac{h}{m_e c} = 0,024 \text{ \AA} \approx 2 \cdot 10^{-10}$ см
Магнетон Бора (магнитный момент электрона)	$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e c} = 9,27 \cdot 10^{-21}$ эрг/Гс
Постоянная тонкой структуры	$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}$
Боровский радиус	$a = \frac{\hbar^2}{m e^2} = 0,53 \cdot 10^{-8}$ см = 0,53 Å
Постоянная Ридберга для атома водорода	$R_H = \frac{me^4}{4\pi\hbar^3 c} = 109737,3 \text{ см}^{-1}$

При необходимости нужно уметь переходить от одной системы единиц к другой, используя связь между соответствующими величинами, например:

$$1\text{Дж} = 10^7 \text{ эрг},$$

$$1\text{эВ} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Дж} = 1,6 \cdot 10^{-12} \text{ эрг},$$

$$1\text{Тл} = 10^4 \text{ Гс.}$$

В теории тепловых явлений может быть использована как система единиц СИ, так и система Гаусса.

Таблица А.2

Названия	Значения
Постоянная Больцмана	$k = 1,38 \cdot 10^{-16} \frac{\text{эрг}}{K} = 1,38 \cdot 10^{-23} \frac{\text{Дж}}{K}$
Универсальная газовая постоянная	$R = 8,31 \frac{\text{Дж}}{\text{моль} \cdot K}$
Число Авогадро	$N_A = 6,02 \cdot 10^{23} \frac{1}{\text{моль}}$
Постоянная Стефана - Больцмана	$\sigma = \frac{2\pi^5 k^4}{15h^3 c^2} = 5,67 \cdot 10^{-8} \frac{\text{Вт}}{\text{м}^2 K^4}$
Объём моля идеального газа при н.у. ( $T = 273,15 \text{ K}$ ; $p = 101325 \text{ Па}$ )	$V_m = \frac{RT}{p} = 22,4 \frac{\text{л}}{\text{моль}} = 22,4 \cdot 10^{-3} \frac{\text{м}^3}{\text{моль}}$
Число Лошмидта	$L = \frac{N_A}{V_m} = 2,69 \cdot 10^{19} \frac{1}{\text{см}^3} = 2,69 \cdot 10^{25} \frac{1}{\text{м}^3}$

## Приложение Б (справочное)

### Некоторые определённые интегралы

#### Б.1 Интегралы Пуассона

Интегралы Пуассона – это интегралы вида

$$\mathcal{I}_{2n+1} = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2} x^{2n+1} dx, \quad (\text{Б.1.1})$$

$$\mathcal{I}_{2n} = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2} x^{2n} dx. \quad (\text{Б.1.2})$$

Для вычисления этих интегралов необходимо знать табличные значения для следующих двух интегралов:

$$\mathcal{I}_1 = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2} x \ dx = \frac{1}{\alpha}, \quad (\text{Б.1.3})$$

$$\mathcal{I}_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}. \quad (\text{Б.1.4})$$

Тогда интегралы типа (Б.1..1) и (Б.1..2) могут быть выражены через интегралы (Б.1..3) и (Б.1..4) как производные по параметру  $\alpha$ .  
Например,

$$\mathcal{I}_3 = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2} x^3 dx = -\frac{\partial}{\partial \alpha} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} x \ dx = -\frac{\partial}{\partial \alpha} \mathcal{I}_1 = \frac{1}{\alpha^2}.$$

Аналогично

$$\mathcal{I}_2 = -\frac{\partial}{\partial \alpha} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2} dx = -\frac{\partial}{\partial \alpha} \mathcal{I}_0 = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^3}},$$

$$\mathcal{I}_4 = -\frac{\partial}{\partial \alpha} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-\alpha x^2} dx = -\frac{\partial}{\partial \alpha} \mathcal{I}_2 = \frac{3}{4} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^5}}.$$

Для курсов квантовой механики и статистической физики в первую очередь необходимы интегралы типа (Б.1.2). Наиболее употребительными являются интегралы, приведённые в таблице Б.1.

Таблица Б.1 – Интегралы Пуассона

Интегралы Пуассона	Значение
$\mathcal{I}_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2} dx$	$\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$
$\mathcal{I}_2 = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2} x^2 dx$	$\frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^3}}$
$\mathcal{I}_4 = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2} x^4 dx$	$\frac{3}{4} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^5}}$

## Б.2 Некоторые определённые интегралы квантовой статистики

$$1) \int_0^{\infty} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = \frac{\pi^4}{15}.$$

$$2) \int_0^{\infty} \frac{x^2 dx}{e^x - 1} = 2,404.$$

$$3) \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{x} dx}{e^x - 1} = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \cdot 2,612 = 2,31.$$

$$4) \int_0^{\infty} \frac{x dx}{e^x - 1} = \frac{\pi^2}{6}.$$

$$5) \int_0^{\infty} \frac{x^{3/2} dx}{e^x - 1} = \frac{3}{4} \sqrt{\pi} \cdot 1,341.$$

$$6) \int_0^{\infty} x^{3/2} e^{-x} dx = \frac{3}{4} \sqrt{\pi}.$$

$$7) \int_0^{\infty} \sqrt{x} e^{-x} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2}.$$

## Б.3. Интеграл ошибок

В статистической физике часто используется интеграл ошибок (например, в задачах на распределение частиц идеального газа по скоростям – распределение Максвелла). Он определяется следующим образом:

$$\Phi(z) = \text{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-x^2} dx, \quad 0 \leq z \leq 3 \quad (\text{Б. 3.1})$$

Некоторые значения интеграла (Б.3.1) приведены в таблице 10.

Таблица 10 – Некоторые значения интеграла ошибок

$z$	0.5	1	1.08	1.13	1.2	2
$erf(z)$	0,5205	0,8427	0,8733	0,8900	0,9103	0,9953

Значения интеграла (Б.3.1) при других  $z$  можно найти в учебнике В.Ф. Ноздрёва [17]

## Приложение В (справочное)

### Дельта-функция Дирака

Дельта-функция была введена в физику выдающимся английским физиком-теоретиком Полем Дираком. Она имеет максимум при  $x=0$  и быстро убывает в обе стороны от этой точки. Примером процесса, для описания которого в курсе «Методы математической физики» используется  $\delta$  –функция Дирака, является теплопроводность. Распределение температуры в стержне для различных моментов времени имеет дельтаобразный вид (рис. В.1).

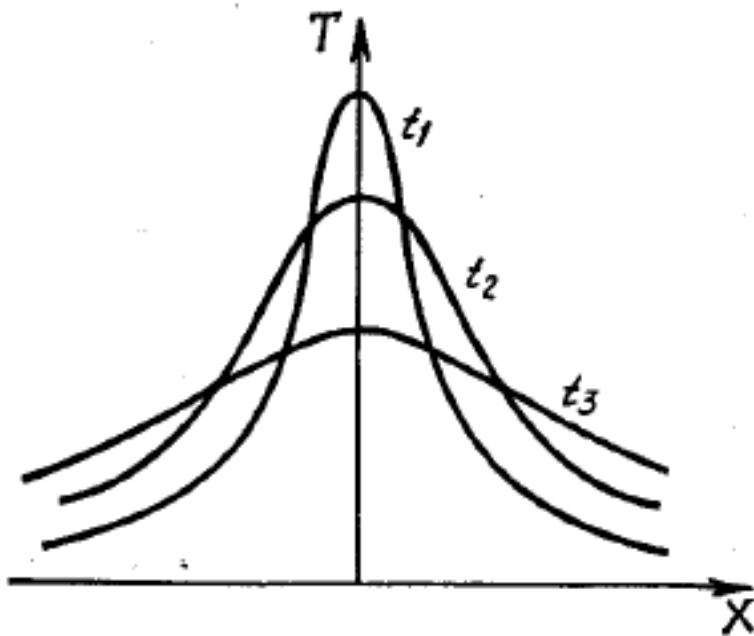


Рисунок В.1 – Распределение температуры в стержне

$\delta$  –функция определяется следующим образом:

$$\delta(x) = \begin{cases} 0, & \text{если } x \neq 0 \\ \infty, & \text{если } x = 0; \end{cases}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) dx = 1; \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - a) dx = 1.$$

Свойства  $\delta$  –функции:

- 1)  $\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \delta(x) dx = f(0);$
- 2)  $\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \delta(x - a) dx = f(a);$
- 3)  $\delta(x) = \delta(-x);$
- 4)  $\delta(\alpha x) = \frac{1}{|\alpha|} \delta(x),$  где  $\alpha = \text{const.}$

Существует достаточно много функций, которые могут быть представлены в виде  $\delta$  –функции. Приведём некоторые примеры:

$$\begin{aligned} 1) \delta(x) &= \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{\sin(Lx)}{\pi x}; \quad 2) \delta(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-x^2}; \quad 3) \delta(x) = \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} dk. \end{aligned}$$

**Приложение Г.**  
**(справочное)**

**Некоторые специальные функции**

№	Название уравнения	Вид уравнения	Функции, являющиеся решением данного уравнения	Примеры задач
1	2	3	4	5
1	Бесселя	$y'' + \frac{1}{x}y' + \left(1 - \frac{n^2}{x^2}\right)y = 0$	Функции Бесселя (цилиндрические функции) $y = J_n(x)$ $= \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{1}{\Gamma(k+1)\Gamma(k+1+n)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2k+n}$	Решение уравнения Лапласа в цилиндрических координатах; колебания круглой мембранны

*Продолжение таблицы*

1	2	3	4	5
2	Лежандра	$[(1 - x^2)y']' + \lambda y = 0$	Полиномы Лежандра (формула Родрига) $y = P_\ell(x) = \frac{1}{2^\ell \ell!} \frac{d^\ell (x^2 - 1)^\ell}{dx^\ell}$	Движение в поле центральных сил (атом водорода)
3	Присоединённых функций Лежандра	$[(1 - x^2)y']' + \left(\lambda - \frac{m^2}{1 - x^2}\right)y = 0$	Присоединённые полиномы Лежандра $P_\ell^m(x) = (1 - x^2)^{\frac{ m }{2}} \frac{d^{ m }}{dx^{ m }} P_\ell(x)$	Движение в поле центральных сил (атом водорода)

*Продолжение таблицы*

1	2	3	4	5
4	Чебышёва – Лагерра	$xy'' + (1 - x)y' + ny = 0$	Полиномы Лагерра $y = L_n(x) = \frac{1}{n!} e^x \frac{d^n}{dx^n} (x^n e^{-x})$	Движение в ку- лоновском поле (атом во- дорода)
5	Чебышёва–Эрмита	$y'' - 2xy' + \lambda y = 0$	Полиномы Эрмита – Чебышёва $y = H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x^2})$	Линейный гар- монический ос- циллятор

## Приложение Д (справочное)

### Основные формулы

#### Раздел 1 Квантовая механика

1.1. Формула Планка для спектральной плотности равновесного излучения

$$\rho_\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \cdot \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1},$$

где  $h$  – постоянная Планка.

1.2. Энергия и импульс фотона в теории фотонов Эйнштейна

$$\begin{aligned}\varepsilon &= h\nu, \\ p &= \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}.\end{aligned}$$

1.3. Комptonовская длина волны

$$\Lambda = \frac{h}{m_0 c}.$$

1.4. Второй постулат Бора

$$h\nu_{mn} = E_m - E_n.$$

1.5. Обобщённая формула Бальмера

$$\frac{1}{\lambda_{mn}} = R \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right),$$

где  $R$  – постоянная Ридберга.

1.6. Правило квантования круговых орбит в теории водородоподобного атома по Бору

$$rm\nu = n\hbar.$$

1.7. Радиус стационарных орбит, скорость электрона на стационарных орбитах, энергетический спектр водородоподобного атома в теории Бора:

$$r_n = \frac{n^2 \hbar^2}{mZe^2},$$

$$\nu_n = \frac{Ze^2}{n\hbar},$$

$$E_n = -\frac{mZ^2 e^4}{2n^2 \hbar^2}.$$

1.8. Связь между волновыми и корпускулярными характеристиками микрочастицы согласно гипотезе де Бройля

$$\nu = \frac{\epsilon}{h},$$

$$\lambda = \frac{h}{p}.$$

1.9. Волновая функция де Бройля для свободной частицы

$$\Psi = A e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p} \cdot \vec{r} - Et)}.$$

1.10. Уравнение Шрёдингера в общем виде

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + U\Psi,$$

где  $U$  – потенциальная энергия.

1.11. Стационарное уравнение Шрёдингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + U\Psi = E\Psi.$$

1.12. Плотность вероятности

$$w = |\Psi|^2.$$

1.13. Плотность тока вероятности

$$\vec{J}_w = \frac{i\hbar}{2m} (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi).$$

1.14. Оператор импульса

$$\begin{aligned} \hat{p}_x &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \quad \hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}, \\ \hat{\vec{p}} &= -i\hbar \nabla. \end{aligned}$$

1.15. Оператор момента импульса в декартовой системе координат:

$$\begin{aligned} \hat{K}_x &= (y\hat{p}_z - z\hat{p}_y) = -i\hbar \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right), \\ \hat{K}_y &= (z\hat{p}_x - x\hat{p}_z) = -i\hbar \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right), \\ \hat{K}_z &= (x\hat{p}_y - y\hat{p}_x) = -i\hbar \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right), \\ \hat{\vec{K}} &= -i\hbar [\vec{r} \nabla]. \end{aligned}$$

1.16. Оператор момента импульса в сферических координатах:

$$\begin{aligned} \hat{K}_x &= i\hbar \left( \sin\varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cos\varphi \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \\ \hat{K}_y &= -i\hbar \left( \cos\varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \sin\varphi \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \\ \hat{K}_z &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}, \\ \hat{K}^2 &= -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]. \end{aligned}$$

1.17. Оператор энергии (гамильтониан)

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U.$$

1.18. Принцип суперпозиции состояний

$$\Psi = c_1 \Psi_1 + c_2 \Psi_2, \quad \Psi = \sum_n c_n \Psi_n,$$

где  $c_n$  -- произвольные комплексные числа.

1.19. Определение эрмитового (самосопряжённого) оператора

$$\int_V \Psi_m^* \hat{L} \Psi_n dV = \int_V (\hat{L} \Psi_m)^* \Psi_n dV,$$

$$\hat{L} = \hat{L}^+.$$

1.20. Условие ортонормировки волновых функций

$$\int_V \Psi_m^* \Psi_n dV = \delta_{mn} = \begin{cases} 1 \text{ при } m = n, \\ 0 \text{ при } m \neq n, \end{cases}$$

или в обозначениях Дирака

$$\langle m | n \rangle = \delta_{mn} = \begin{cases} 1 \text{ при } m = n, \\ 0 \text{ при } m \neq n, \end{cases}$$

где  $\delta_{mn}$  -- дельта-символ Кронекера,  $\langle \Psi_m |$  -- бра-вектор,  $|\Psi_n \rangle$  -- кет-вектор.

1.21. Среднее значение физической величины  $L$  в состоянии  $\Psi$

$$\bar{L} = \int_V \Psi^* \hat{L} \Psi dV,$$

или

$$\bar{L} = \langle \Psi | \hat{L} | \Psi \rangle.$$

1.22. Условие коммутативности двух операторов

$$\hat{M} \hat{L} - \hat{L} \hat{M} = 0,$$

или

$$[\hat{M}, \hat{L}]_- = 0.$$

1.23. Неравенство Гейзенберга для координаты и импульса

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}.$$

1.24. Неравенство Гейзенберга для энергии и времени

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar.$$

1.25. Правило дифференцирования оператора по времени

$$\frac{d\hat{L}}{dt} = \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} + \{\hat{H}, \hat{L}\},$$

где

$$\{\hat{H}, \hat{L}\} = \frac{i}{\hbar} (\hat{H}\hat{L} - \hat{L}\hat{H})$$

квантовые скобки Пуассона.

1.26. Квантовое обобщение уравнения Гамильтона – Якоби (КОУГЯ)

$$-\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{(\nabla S)^2}{2m} + U - \frac{i\hbar}{2m} \nabla^2 S,$$

где  $S$  – квантовое обобщение классической функции действия.

1.27. Стационарное КОУГЯ

$$\frac{(\nabla S)^2}{2m} + U - \frac{i\hbar}{2m} \nabla^2 S = E.$$

1.28. Уровни энергии и волновые функции частицы в одномерной бесконечно глубокой потенциальной яме:

$$E_n = \frac{n^2 \hbar^2}{8m\ell^2},$$

$$\Psi_n = A \sin \frac{n\pi}{\ell} x,$$

где  $\ell$  – ширина ямы.

1.29. Уровни энергии и волновые функции стационарных состояний ЛГО

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right), n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

$$\Psi_n = C_n e^{-\frac{\xi^2}{2}} \cdot H_n(\xi),$$

где  $C_n$  – нормировочный множитель

$$C_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n! x_0 \sqrt{\pi}}},$$

$H_n(\xi)$  – полином Чебышёва – Эрмита

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} (e^{-\xi^2}),$$

$$\xi = \frac{x}{x_0}, \quad x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}.$$

1.30. Правило отбора для ЛГО

$$\Delta n = \pm 1,$$

с учётом которого получаются ненулевые матричные элементы координаты

$$x_{n-1,n} = x_0 \sqrt{\frac{n}{2}}, \quad x_{n+1,n} = x_0 \sqrt{\frac{n+1}{2}}.$$

1.31. Коэффициенты отражения  $R$  и прозрачности  $D$  при движении частицы в поле потенциальной ступеньки:

$$R = \left( \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2,$$

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

где  $k_1$  и  $k_2$  – волновые числа в области  $U = 0$  и в области  $U = U_0$ .

1.32. Вероятность прохождения частицы через потенциальный барьер прямоугольной формы

$$D = D_0 e^{-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} \ell},$$

где  $\ell$  – толщина барьера,

$$D_0 = \frac{16E(U_0 - E)}{U_0^2}.$$

1.33. Коэффициент прозрачности потенциального барьера произвольной формы

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

1.34. Фотонные пары в состояниях Белла как пример запутанных квантовых состояний:

$$|\Psi^-\rangle = \frac{|0\rangle_1 |1\rangle_2 - |1\rangle_1 |0\rangle_2}{\sqrt{2}},$$

$$|\Psi^+\rangle = \frac{|0\rangle_1 |1\rangle_2 + |1\rangle_1 |0\rangle_2}{\sqrt{2}},$$

$$|\Phi^-\rangle = \frac{|0\rangle_1 |0\rangle_2 - |1\rangle_1 |1\rangle_2}{\sqrt{2}},$$

$$|\Phi^+\rangle = \frac{|0\rangle_1 |0\rangle_2 + |1\rangle_1 |1\rangle_2}{\sqrt{2}}.$$

Они представляют собой суперпозицию состояний пар одинаково поляризованных фотонов ( $|\uparrow\uparrow\rangle = |00\rangle$  и  $|\leftrightarrow\leftrightarrow\rangle = |11\rangle$ ) и ортогонально поляризованных фотонов ( $|\uparrow\leftrightarrow\rangle = |01\rangle$  и  $|\leftrightarrow\uparrow\rangle = |10\rangle$ ).

1.35. Квантование момента импульса  $K$ , его проекции  $K_z$  и магнитного момента  $\mu_z$  при движении микрочастицы в центрально-симметричном поле::

$$K = \hbar\sqrt{\ell(\ell + 1)}, \quad K_z = m\hbar, \quad \mu_z = m\mu_B,$$

где  $\ell = 0, 1, 2, 3 \dots$  – орбитальное квантовое число,  $m = 0, 1, 2, 3, \dots, \ell$  – магнитное квантовое число,  $\mu_B$  –магнетон Бора

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_0c}.$$

1.36. Сферические функции

$$Y_{\ell,m}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{(2\ell + 1)}{4\pi} \frac{(\ell - m)!}{(\ell + m)!}} P_{\ell}^m(\cos\theta) e^{im\varphi},$$

где

$$P_{\ell}^m(\cos\theta) = P_{\ell}^m(x) = \frac{1}{2^{\ell} \ell!} (1 - x^2)^{\frac{|\ell|}{2}} \frac{d^{\ell+|\ell|}}{dx^{\ell+|\ell|}} (x^2 - 1)^{\ell}$$

– присоединённые полиномы Лежандра.

1.37. Метод вычисления сферических функций, основанный на последовательном понижении магнитного квантового числа при данном  $\ell$ :

$$Y_{\ell,\ell}(\theta, \varphi) = C_{\ell,\ell} \sin^{\ell} \theta e^{i\ell\varphi}, \quad m = \ell;$$

$$Y_{\ell,\ell-1}(\theta, \varphi) = C_{\ell,\ell-1} \cos \theta \sin^{\ell-1} \theta e^{i(\ell-1)\varphi}, \quad m = \ell - 1;$$

$$Y_{\ell,\ell-2}(\theta, \varphi) = C_{\ell,\ell-2} \sin^{\ell-2} \theta [1 - (2\ell - 1) \cos^2 \theta] e^{i(\ell-2)\varphi},$$

$$m = \ell - 2.$$

1.38. Радиальная волновая функция электрона в водородоподобном атоме

$$R_{n\ell}(r) = C_{n\ell} r^\ell L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(r) e^{-\frac{Z}{na}r},$$

где  $L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(r)$  – полиномы Лагерра,  $n = n_r + \ell + 1$  – главное квантовое число,  $n_r$  – радиальное квантовое число,

$$C_{n\ell} = \left(\frac{Z}{na}\right)^{3/2} \sqrt{\frac{4}{n(n-\ell-1)! (n+\ell)!}}$$

– нормировочный множитель.

1.39. Энергетический спектр водородоподобного атома в теории Шрёдингера

$$E_n = -\frac{m_0 Z^2 e^4}{2n^2 \hbar^2}.$$

1.40. Поправка первого порядка к невозмущенному уровню энергии

$$E_n^{(1)} = \langle \Psi_n^0 | \widehat{W} | \Psi_n^0 \rangle,$$

где  $\widehat{W}$  – оператор возмущения.

1.41. Поправка второго порядка малости к невозмущенному уровню энергии

$$E_n^{(2)} = \sum_{k(\neq n)} \frac{|\langle n^0 | \widehat{W} | k^0 \rangle|^2}{E_n^0 - E_k^0}.$$

1.42. Волновые функции в первом порядке теории возмущений

$$\Psi_n = \Psi_n^0 + \sum_{k(\neq n)} \frac{\langle \Psi_k^0 | \hat{W} | \Psi_n^0 \rangle}{E_n^0 - E_k^0} \Psi_k^0.$$

1.43. Уровни энергии возмущённой системы при наличии двукратного вырождения

$$E = E_0 + \frac{W_{11} + W_{22}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{W_{11} - W_{22}}{2}\right)^2 + |W_{12}|^2}.$$

1.44. Вероятность электрических дипольных переходов в единицу времени в первом приближении теории возмущений

$$\int \mathcal{P}_{nm}^{(I)} d\omega = \frac{4\pi^2}{3\hbar^2} |ex_{mn}|^2 \bar{\rho}|_{\omega=\omega_{mn}},$$

где  $\bar{\rho}|_{\omega=\omega_{mn}}$  – средняя плотность энергии излучения на резонансной частоте  $\omega = \omega_{mn}$ .

1.45. Коэффициенты Эйнштейна для спонтанных  $A_{mn}$  и вынужденных  $B_{mn}$  квантовых переходов

$$A_{mn} = \frac{4\omega_{mn}^3}{3\hbar c^3} |ex_{mn}|^2,$$

$$B_{mn} = \frac{4\pi^2}{3\hbar^2} |ex_{mn}|^2.$$

1.46. Правила отбора для орбитального и магнитного квантовых чисел при электрических дипольных переходах:

$$\ell' = \ell \pm 1, \text{ или } \Delta\ell = \pm 1,$$

$$m' = m; m \pm 1, \text{ или } \Delta m = 0, \pm 1.$$

1.47. Выражения для операторов спина через спиновые матрицы Паули:

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_x, \quad \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_y, \quad \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_z,$$

где

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

1.48. Квантование полного момента импульса и его проекции

$$\mathcal{J}^2 = \hbar^2 j(j+1),$$

$$\mathcal{J}_z = m_j \hbar,$$

где  $j = 1/2, 3/2, 5/2, \dots$  – внутреннее квантовое число,  $m_j = \pm 1/2, \pm 3/2, \pm 5/2, \dots \pm j$  – магнитное квантовое число полного момента импульса.

1.49. Множитель Ланде (фактор спектроскопического расщепления)

$$g_j = 1 + \frac{j(j+1) + \ell_s(\ell_s+1) - \ell(\ell+1)}{2j(j+1)}.$$

1.50. Формула расщепления уровней энергии в слабом магнитном поле в аномальном эффекте Зеемана

$$\frac{\Delta\omega}{\omega_L} = m_j g_j - m'_j g'_j,$$

где ларморовская частота

$$\omega_L = \frac{e\mathcal{H}}{2m_0c},$$

$\mathcal{H}$  – напряжённость внешнего магнитного поля.

1.51. Уровни энергии в атоме гелия:

$$E_1 = E_0 + K - A,$$

$$E_2 = E_0 + K + A,$$

где кулоновский  $K$  и обменный интеграл  $A$  имеют вид

$$K = \int_{V_1} \int_{V_2} \Psi_a^*(1) \Psi_b^*(2) \frac{e^2}{r_{1,2}} \Psi_a(1) \Psi_b(2) dV_1 dV_2,$$

$$A = \int_{V_1} \int_{V_2} \Psi_a^*(1) \Psi_b^*(2) \frac{e^2}{r_{1,2}} \Psi_a(2) \Psi_b(1) dV_1 dV_2.$$

1.52. Синглетные и триплетные состояния двухэлектронной системы

$$\Psi_S = \frac{1}{\sqrt{2}} [(1) \uparrow (2) \downarrow - (1) \downarrow (2) \uparrow], S = 0, S_z = 0;$$

$$\Psi_T = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{cases} (1) \uparrow (2) \uparrow & S_z = 1 \\ (1) \uparrow (2) \downarrow + (1) \downarrow (2) \uparrow & S_z = 0 \\ (1) \downarrow (2) \downarrow & S_z = -1 \end{cases} (S = 1).$$

1.53. Уровни энергии в молекуле водорода

$$U_1 = 2E_0 + \frac{e^2}{R} + \frac{K - A}{1 - \varsigma^2},$$

$$U_1 = 2E_0 + \frac{e^2}{R} + \frac{K + A}{1 + \varsigma^2},$$

где

$$\varsigma = \int \Psi_a(1) \Psi_b(1) dV_1 = \int \Psi_a(2) \Psi_b(2) dV_2$$

— интеграл неортогональности (перекрытия волновых функций),  $R$  — межъядерное расстояние.

1.54. Связь спина с валентностью

$$\sigma = 2s.$$

1.55. Формула Резерфорда для дифференциального эффективного сечения рассеяния

$$d\sigma = \left( \frac{Ze^2}{m\sigma^2} \right)^2 \frac{d\Omega}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}.$$

## Раздел 2 Статистическая физика и термодинамика

2.1. Фазовая плотность вероятности (функция статистического распределения)

$$\rho = \frac{dW}{dq \ dp},$$

где  $dW$  – вероятность того, что координаты фазового пространства находятся в некотором элементе объёма  $d\Gamma = (dq \cdot dp)$ .

2.2. Среднее значение термодинамической величины

$$\bar{L} = \langle L \rangle = \int L \ dW = \int L \ \rho \ d\Gamma.$$

2.3. Функция распределения молекул идеального газа по модулям скоростей (распределение Максвелла)

$$f(v) = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{m}{2kT} \right)^{3/2} v^2 e^{-\frac{mv^2}{2kT}}.$$

2.4. Характерные скорости максвелловского распределения (наиболее вероятная, средняя, среднеквадратичная):

$$v_{\text{в}} = \sqrt{\frac{2kT}{m}} = \sqrt{\frac{2RT}{\mu}},$$

$$\bar{v} = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}} = \sqrt{\frac{8RT}{\pi\mu}},$$

$$\sqrt{\bar{v}^2} = \sqrt{\frac{3kT}{m}} = \sqrt{\frac{3RT}{\mu}};$$

$$v_B : \bar{v} : \sqrt{\bar{v}^2} = 1 : 1,13 : 1,22.$$

2.5. Распределение Больцмана во внешнем силовом поле

$$dW(\vec{r}) = A e^{-\frac{U(\vec{r})}{kT}} dV,$$

где  $dW(\vec{r})$  – вероятность того, что радиус-вектор  $\vec{r}(x, y, z)$  молекулы идеального газа, находящегося во внешнем силовом поле в состоянии равновесия при температуре  $T$ , попадает в интервал  $\vec{r} \div \vec{r} + d\vec{r}$ ,  $U(\vec{r})$  – потенциальная энергия частицы,  $dV$  – элемент объема,  $A$  – нормировочная константа.

2.6. Барометрическая формула

$$p = p_0 e^{-\frac{mgz}{kT}}.$$

2.7. Микроканоническое распределение Гиббса:

а) классическое

$$\rho = \begin{cases} \frac{1}{\Delta\Gamma(E_0)}, & \text{если } E_0 \leq E \leq E_0 + \Delta E; \\ 0, & \text{если } E \text{ вне этого интервала,} \end{cases}$$

где  $\Delta\Gamma(E_0)$  – элемент фазового объема;

б) квантовое

$$W(E_n) = \begin{cases} \frac{1}{\Delta\Gamma(E)}, & \text{если } E \leq E_n \leq E + \Delta E; \\ 0, & \text{если } E_n \text{ находится вне этого слоя,} \end{cases}$$

где  $\Delta\Gamma(E)$  – статистический вес.

2.8. Каноническое распределение Гиббса:

а) в классической статистике

$$\rho = A e^{-\frac{E}{kT}},$$

где нормировочный множитель  $A = 1/z$ ,  $z$  – статистический интеграл;

б) в квантовой статистике

$$W_n = \frac{e^{-\frac{E_n}{kT}}}{z},$$

где  $z$  – статистическая сумма. В общем случае

$$W_n = \frac{g_n e^{-\frac{E_n}{kT}}}{z},$$

где  $g_n$  – кратность вырождения уровня энергии  $E_n$ .

2.9. Статистический интеграл (интеграл состояний)

$$z = \int_{\Gamma} e^{-\frac{E}{kT}} d\Gamma.$$

2.10. Статистическая сумма (сумма состояний)

$$z = \sum_n e^{-\frac{E_n}{kT}}.$$

В общем случае

$$z = \sum_n g_n e^{-\frac{E_n}{kT}}.$$

2.11. Большое каноническое распределение

а) классическое

$$\rho = A e^{\frac{\mu N - E}{kT}},$$

где  $A = 1/Z$ ,  $Z$  – статистический интеграл

$$Z = \sum_{N=0}^{\infty} \int_{\Gamma} e^{\frac{\mu N - E}{kT}} d\Gamma,$$

$\mu$  – химический потенциал;

б) квантовое

$$W_n = \frac{e^{\frac{\mu N_n - E_n}{kT}}}{Z},$$

где  $Z$  – большая статистическая сумма

$$Z = \sum_{N_n} \sum_n e^{\frac{\mu N_n - E_n}{kT}}.$$

2.12. Связь свободной энергии с интегралом состояний

$$F = -kT \ell n z.$$

2.13. Выражение для большого термодинамического потенциала через большую статсумму

$$\Omega = -kT \ell n Z.$$

2.14. Связь внутренней энергии идеального газа со статистическим интегралом

$$U = \bar{E} = kT^2 \left( \frac{\partial \ell n z}{\partial T} \right)_V.$$

2.15. Выражение для давления через статистический интеграл

$$p = \frac{kT}{z} \left( \frac{\partial z}{\partial V} \right)_T.$$

2.16. Связь энтропии со статистическим интегралом

$$S = k \left( \ell n z + T \frac{\partial \ell n z}{\partial T} \right).$$

2.17. Принцип Больцмана

$$S = k \ell n W,$$

где  $S$  – энтропия макросостояния системы,  $W$  – термодинамическая вероятность.

2.18. Энтропия как функция статистического распределения (распределения вероятностей отдельных микросостояний системы)

$$S = -k \sum_n W_n \cdot \ell \ln W_n.$$

2.19. Интеграл состояний одноатомного идеального газа из  $N$  частиц

$$Z_{\text{ид}} = \frac{1}{N! h^{3N}} (2\pi m kT)^{\frac{3N}{2}} V^N.$$

2.20. Функции распределения квантовых статистик:

а) функция распределения Ферми – Дирака

$$f = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{kT}} + 1} ;$$

б) функция распределения Бозе – Эйнштейна

$$f = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{kT}} - 1} ;$$

в) функция распределения Джентиле (промежуточной квантовой статистики)

$$f = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{kT}} - 1} - \frac{(N+1)}{e^{\frac{(N+1)(E-\mu)}{kT}} - 1},$$

где  $N$  – максимальное число частиц в данном квантовом состоянии.

2.21. Температура вырождения

$$T_0 = \frac{h^2}{2\pi m k} n^{2/3},$$

где  $n$  – концентрация частиц в газе,  $m$  – масса частицы.

2.22. Теорема о равномерном распределении энергии по степеням свободы

$$\bar{E}_{\text{кин}} = \frac{kT}{2}.$$

## 2.23. Химический потенциал

$$\mu = \left( \frac{\partial \mathcal{P}}{\partial N} \right)_{y, \theta} \mu = -T \frac{\partial S}{\partial N},$$

где  $\mathcal{P}$  – термодинамический потенциал (внутренняя энергия, свободная энергия, энталпия, энергия Гиббса, большой термодинамический потенциал),  $y$  – набор механических параметров ( $p, V$ ),  $\theta$  – набор термических переменных ( $T, S$ ),  $N$  – число частиц в системе.

## 2.24. Термодинамические потенциалы

Таблица Д.1 – Характеристические функции

Термодинамический потенциал	Формула	Полный дифференциал
1.Внутренняя энергия	$U(V, S)$	$dU = TdS - pdV$
2.Свободная энергия (или энергия Гельмгольца)	$F(V, T) = U - TS$	$dF = -pdV - SdT$
3.Энталпия (теплосодержание)	$H(p, S) = U + pV$	$dH = TdS + Vdp$
4.Энергия Гиббса	$G(p, T) = U + pV - TS$ $G = H - TS$ $G = F + pV$	$dG = Vdp - SdT$
5.Большой термодинамический потенциал	$\Omega(V, T, N) = U - TS - \mu N$ $\Omega = -pV$	$d\Omega = -pdV - SdT - \mu dN$

2.25. Нулевое начало термодинамики

$$\oint dT = 0.$$

2.26. Термодинамическое определение абсолютной температуры

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E},$$

где  $S$  –энтропия.

2.27. Связь абсолютной температуры с населённостью энергетических уровней двухуровневой системы

$$T_{1,2} = \frac{\Delta E}{k \ell n \frac{N_1}{N_2}},$$

где  $N_1$  и  $N_2$  – населённости уровней (число частиц на каждом уровне),  $\Delta E$  – расстояние между уровнями.

2.28. Первое начало термодинамики для элементарного процесса перехода системы из одного состояния в бесконечно близкое

$$\delta Q = dU + \delta A,$$

где  $\delta Q$  – количество теплоты,  $dU$  –изменение внутренней энергии,  $\delta A$  – элементарная работа.

2.29. Теплоёмкость

$$C = \frac{\delta Q}{dT},$$

где  $\delta Q$  –количество теплоты, необходимое для изменения температуры системы на  $dT$ .

2.30. Уравнение Майера

$$C_p = C_V + R,$$

связывающее теплоёмкости при постоянном объёме  $C_V$  и постоянном давлении  $C_p$ .

2.31. Уравнение состояния идеального газа (уравнение Клапейрона – Менделеева)

$$pV = \nu RT,$$

где  $\nu = m/\mu$  – число молей газа массой  $m$ ,  $\mu$  – молярная масса,  $R = 8.31$  Дж/моль·К (универсальная газовая постоянная).

2.32. Уравнения основных термодинамических процессов:

а) изотермический ( $T = \text{const}$ ), закон Бойля-Мариотта

$$pV = \text{const}, \quad \frac{p_1}{p_2} = \frac{V_2}{V_1};$$

б) изобарный ( $p = \text{const}$ ), закон Гей-Люссака

$$\frac{V_1}{V_2} = \frac{T_1}{T_2}, \quad V_t = V_0(1 + \alpha t),$$

где  $\alpha$  – коэффициент теплового расширения газа;

в) изохорный ( $V = \text{const}$ ), закон Шарля

$$\frac{P_1}{P_2} = \frac{T_1}{T_2}, \quad p_t = p_0(1 + \beta t),$$

где  $\beta$  – термический коэффициент давления;

г) адиабатный ( $S = \text{const}$ ), уравнение Пуассона

$$PV^\gamma = \text{const},$$

где  $\gamma = \frac{C_p}{C_V}$  – показатель адиабаты;

д) политропный ( $C = \text{const}$ )

$$pV^n = \text{const},$$

где  $n = \frac{C - C_p}{C - C_V}$  – показатель политропы.

2.33. Второе начало термодинамики для равновесных процессов:

а) в дифференциальной форме

$$\frac{\delta Q}{T} = dS \text{ или } \delta Q = TdS;$$

б) интегральное уравнение для равновесных круговых процессов (равенство Клаузиуса)

$$\oint \frac{\delta Q}{T} = 0.$$

2.34. Основное термодинамическое тождество для обратимых процессов

$$TdS = dU + \delta A.$$

2.35. Третье начало термодинамики

$$\lim_{T \rightarrow 0K} [S(T, x_2) - S(T, x_1)] = 0,$$

или

$$\lim_{T \rightarrow 0K} \left( \frac{\partial S}{\partial x} \right)_T = 0,$$

где  $x$  – любой термодинамический параметр.

2.36. Уравнение Гиббса – Гельмгольца

а) для свободной энергии

$$F = U + T \left( \frac{\partial F}{\partial T} \right)_V;$$

б) для энергии Гиббса

$$G = H + T \left( \frac{\partial G}{\partial T} \right)_p.$$

2.37. Связь между термическим и калорическим уравнениями состояния

$$T \left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_V = \left( \frac{\partial U}{\partial V} \right)_T + p.$$

2.38. К.п.д. тепловой машины

$$\eta = \frac{A}{Q_1} = \frac{Q_1 - Q_2}{Q_1}.$$

2.39. К.п.д. цикла Карно

$$\eta = \frac{T_1 - T_2}{T_1} = 1 - \frac{T_2}{T_1}.$$

2.40. Уравнение Ван-дер-Ваальса

$$\left( p + \frac{\nu^2 a}{V^2} \right) (V - \nu b) = \nu R T,$$

где  $\nu$  – число молей.

2.41. Параметры критической изотермы:

$$V_k = 3b, \quad p_k = \frac{a}{27b^2}, \quad T_k = \frac{8a}{27Rb}.$$

2.42. Температура инверсии газа

$$T_i = \frac{2a}{Rb}.$$

2.43. Уравнение Клапейрона – Клаузиуса для фазовых переходов I рода

$$\frac{dp}{dT} = \frac{\lambda}{T(v_B - v_A)},$$

где  $\lambda$  – теплота фазового перехода на моль или грамм вещества;  $(v_B - v_A)$  – изменение удельного объёма.

2.44. Уравнения Эренфеста в теории фазовых переходов II рода:

$$\Delta C_p = T \Delta \left( \frac{\partial \nu}{\partial T} \right)_p \frac{dp}{dT},$$

$$\Delta C_v = -T \Delta \left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_v \frac{d\nu}{dT}.$$

2.45. Правило фаз Гиббса

$$n \leq r + 2,$$

согласно которому в системе из  $r$  компонентов одновременно может находиться в равновесии не больше чем  $(r + 2)$  фазы.

2.46. Формула Эйнштейна – Смолуховского для среднеквадратичного смещения броуновской частицы

$$\Delta x = \sqrt{\bar{x^2}} = \sqrt{\frac{kT}{3\pi\eta a}} \sqrt{t},$$

где  $a$  – размер частицы,  $\eta$  – вязкость среды.

2.47. Формула Рэлея для интенсивности рассеяния света

$$I = I_0 \frac{\pi^2}{2\lambda^4} \frac{(\varepsilon - 1)^2}{N} (1 + \cos^2\theta),$$

где  $N$  – число частиц в рассеивающем объёме.

2.48. Формула Найквиста для флуктуационной ЭДС (частотное распределение шума, обусловленного случайными тепловыми ЭДС)

$$\varepsilon^2(\nu) = 4kTR(\nu).$$

2.49. Кинетическое уравнение Больцмана

$$\left( \frac{df}{dt} \right)_{\text{перен.}} = \left( \frac{df}{dt} \right)_{\text{столкн.}}.$$

В приближении времени релаксации

$$\left( \frac{df}{dt} \right)_{\text{столкн.}} = -\frac{f - f_0}{\tau},$$

где  $f_0$  – равновесная функция распределения,  $\tau$  – время релаксации.

2.50.  $H$ -теорема Больцмана

$$\frac{dH}{dt} \geq 0.$$

## Приложение Е (справочное)

### Образец экзаменационного билета

МИНИСТЕРСТВО ПРОСВЕЩЕНИЯ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
Федеральное государственное бюджетное образовательное  
учреждение высшего образования  
«Южно-Уральский государственный гуманитарно-педагогический  
университет»  
(ФГБОУ ВО «ЮУрГГПУ»)  
Кафедра физики и технологии

УТВЕРЖДАЮ:  
Зав. кафедрой  
\_\_\_\_\_ О.Р. Шефер  
«04» сентября  
2025 г.

Теоретическая физика (Квантовая механика.  
Статистическая физика и термодинамика)

### ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № 1

1. Уравнение Шрёдингера. Стационарные состояния, их свойства.
2. Распределение Бозе-Эйнштейна.
3. Атом водорода, находящийся в состоянии  $2\ p$ , помещен в полость с равновесным излучением. При какой температуре вероятности спонтанного и вынужденного излучения будут одинаковыми?

Преподаватель \_\_\_\_\_ Свирская Л.М.

*Учебное издание*

**Свирская Людмила Моисеевна**

**ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА (КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА.  
СТАТИСТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА И ТЕРМОДИНАМИКА)**

Ответственный редактор

Е. Ю. Никитина

Корректор

А. В. Свиридова

Компьютерная верстка

В. М. Жанко

Работа рекомендована РИС ЮУрГПУ

Протокол 6 от 25.12.2025.

Подписано в печать 20. 01. 2026. Формат 60x84 1/16. Усл. печ. л. 8,72.

Тираж 500 экз. Заказ \_\_\_\_\_

Южно-Уральский научный центр Российской академии образования.  
454080, Челябинск, проспект Ленина, 69, к. 455.

Учебная типография Федерального государственного бюджетного  
образовательного учреждения высшего образования «Южно-Уральский  
государственный гуманитарно-педагогический университет. 454080,  
Челябинск, проспект Ленина, 69, каб. 2.