

# **КВАНТОВАЯ ФИЗИКА**

## Строение атома

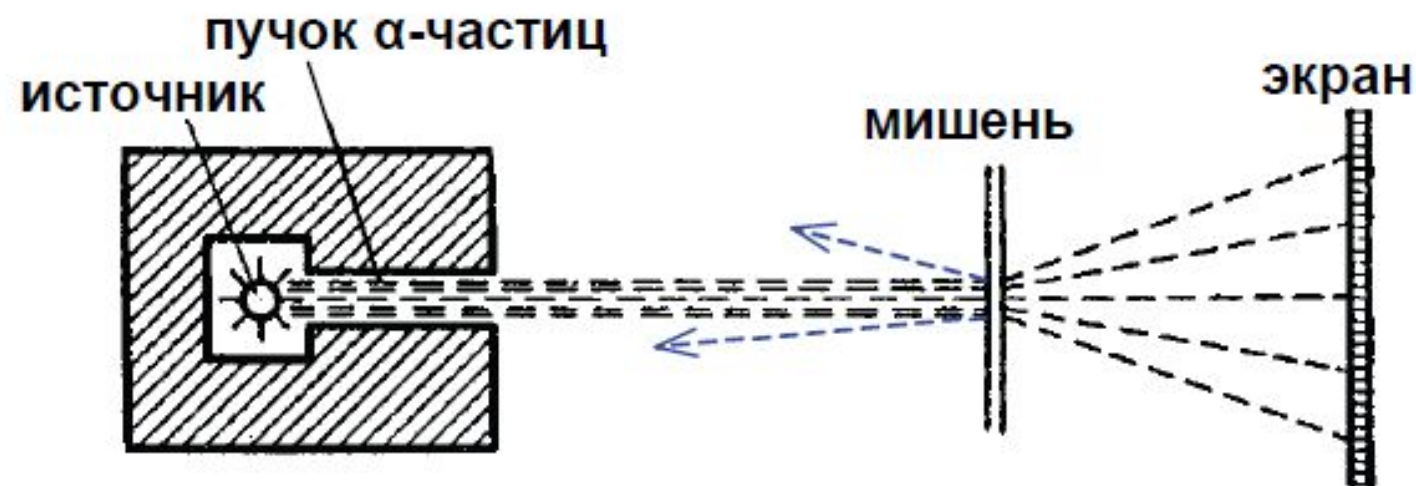
### 1. Модели атома Томсона и Резерфорда.

Представление об атомах, как о *неделимых мельчайших частицах вещества* возникло еще в античные времена.

**Дж. Дж. Томсон**, исследуя отклонение в электрических и магнитных полях частиц, испускаемых под действием света (фотоэффект) *открыл электрон*. Поскольку *масса электрона* оказалась в *десятки тысяч раз меньше масс атомов*, Томсон предложил **модель строения атома**, согласно которой атом представляет собой непрерывно заряженный положительным зарядом шар диаметром  $\sim 10^{-10}$  м в который "вкраплены" электроны ("как изюм в пудинг"). Гармонические колебания электронов около положений равновесия (гармонические осцилляции) являются причиной излучения (или поглощения) монохроматических волн атомами.



Однако, в экспериментах **Ленарда** по рассеянию электронов и в экспериментах **Резерфорда** по рассеянию  $\alpha$ -частиц на тонких металлических пленках, было показано, что почти все частицы проходили через фольгу, без рассеяния или отклоняясь на очень малые углы порядка  $1-3^\circ$ . И только некоторые из них (одна из 10000) отклонялись на



большие углы, порядка  $135-180^\circ$ . Поскольку  $\alpha$ -частица в 7300 раз тяжелее электрона, то причиной такого рассеяния не может быть ее рассеяние на электронах. Резерфорд предположил, что рассеяние  $\alpha$ -частицы происходит на положительном заряде большой массы — "**ядре**" атома, размер которого, очень мал по сравнению с объемом атома (диаметр  $\sim 10^{-14}$  м). (Например, в  $1\text{ м}^3$  платины "объем" ядер равен  $0,3\text{ мм}^3$ .)



Поэтому в атоме, подавляющая часть которого состоит из пустого пространства, электроны не могут находиться в статическом равновесии. Их устойчивость может быть только динамической, как у планет в астрономии.

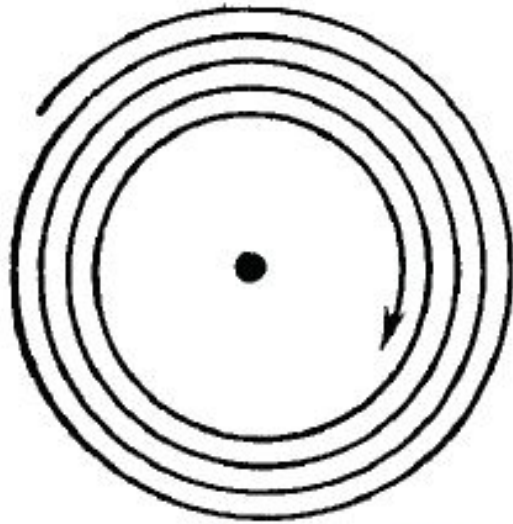
**Резерфорд** предложил **планетарную модель атома**. Согласно Резерфорду, атом представляет собой систему зарядов, в центре которой расположено **положительное ядро** с зарядом  $Ze$ , размером  $10^{-15}$ — $10^{-14}$  м и массой, практически равной массе атома, а вокруг ядра, в области с линейными размерами  $\sim 10^{-10}$  м, по замкнутым орбитам движется  $Z$  электронов, образуя **электронную оболочку атома**.

Второй закон Ньютона для электрона, движущегося по окружности под действием кулоновской силы

$$\frac{Ze \cdot e}{4\pi\epsilon_0 r^2} = \frac{m_e v^2}{r},$$

где  $m_e$  и  $v$  – масса и скорость электрона на орбите радиуса  $r$ ,  $\epsilon_0$  – электрическая постоянная. При  $r \approx 10^{-10}$  м скорость движения электронов  $v \approx 10^6$  м/с, а ускорение  $v^2/r \approx 10^{22}$  м/с<sup>2</sup>. Согласно классической электродинамике, ускоренно





движущиеся электроны должны излучать электромагнитные волны и вследствие этого непрерывно терять энергию. В результате электрон будет приближаться к ядру и в конечном счете *упадет на ядро*.

Кроме того, классическая планетарная модель атома *не объясняет **линейчатого спектра** атомов*.

## 2. Линейчатый спектр атома водорода.

Экспериментальное исследование спектров излучения разреженных газов (отдельных атомов) показали, что характерный линейчатый спектр каждого элемента представляет собой серии линий, положение которых может быть описано простыми эмпирическими формулами. Так, положение линий атома водорода в видимой области спектра описываются **формулой Бальмера**

$$\frac{1}{\lambda} = R' \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), \text{ или } \left( \nu = \frac{c}{\lambda} \right) \text{ для частот: } \nu = R \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (n = 3, 4, 5, \dots),$$

где  $R' = 1,1 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1}$ ,  $R = R' \cdot c = 3,29 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}$  – **постоянная Ридберга**.



Позднее, в ультрафиолетовой области была обнаружена

$$\text{серия Лаймана: } \nu = R \left( \frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (n = 2, 3, 4, \dots),$$

а в инфракрасной области

$$\text{серия Пашена: } \nu = R \left( \frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (n = 4, 5, 6, \dots),$$

$$\text{серия Брэкета: } \nu = R \left( \frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (n = 5, 6, 7, \dots),$$

$$\text{серия Пфунда: } \nu = R \left( \frac{1}{5^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (n = 6, 7, 8, \dots),$$

$$\text{серия Хэмфри: } \nu = R \left( \frac{1}{6^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (n = 7, 8, 9, \dots).$$

Все эти серии могут быть описаны **обобщенной формулой Бальмера**

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

где  $m = 1, 2, 3, 4, 5, 6$  определяет серию, а  $n = m + 1, m + 2, \dots$  определяет отдельные линии этой серии. С увеличением  $n$  линии серии сближаются; значение  $n = \infty$  определяет **границу серии**, к которой со стороны бóльших частот примыкает сплошной спектр.

Аналогичные серии были выделены в линейчатых спектрах других атомов.



### 3. Постулаты Бора.

Для объяснения закономерностей в линейчатых спектрах Бор объединил планетарную модель атома Резерфорда с гипотезой Планка о квантовой природе света. Теория атома Бора основывается на двух постулатах:

**(I) Первый постулат Бора** (*постулат стационарных состояний*): **существуют стационарные** (не изменяющиеся со временем) **состояния атома, находясь в которых он не излучает энергии.** Стационарным состояниям атома соответствуют *стационарные орбиты*, по которым движутся электроны. Каждое стационарное состояние характеризуется *определённым* (дискретным) значением энергии. Движение электронов по стационарным орбитам *не сопровождается* излучением электромагнитных волн.

**Правило квантования орбит Бора** утверждает, что в стационарном состоянии атома электрон, двигаясь по круговой орбите, должен иметь квантованные значения момента импульса, удовлетворяющие условию

$$m_e v r_n = n \hbar \quad (n = 1, 2, 3, \dots),$$

где  $m_e$  – масса электрона,  $v$  – его скорость на  $n$ -й орбите радиуса  $r_n$ ,  
 $\hbar = h/(2\pi)$ .



**(II) Второй постулат Бора** (правило частот): *при переходе атома из одного состояния в другое испускается или поглощается один фотон с энергией*

$$h\nu = E_n - E_m,$$

*равной разности энергий соответствующих стационарных состояний.*

Излучение ( $E_m < E_n$ ) происходит при переходе атома *из состояния с бóльшей энергией в состояние с меньшей энергией* (при переходе электрона с орбиты более удаленной от ядра на ближнюю к ядру орбиту).

Поглощение фотона ( $E_m > E_n$ ) сопровождается переходом атома *в состояние с бóльшей энергией* (переход электрона на более удаленную от ядра орбиту).

**Набор всевозможных дискретных частот** квантовых переходов

$$\nu = \frac{E_n - E_m}{h}$$

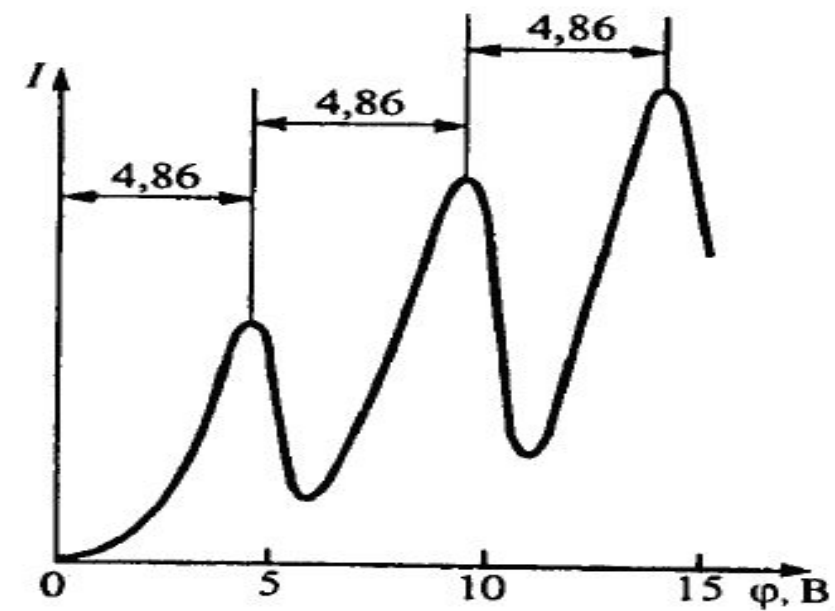
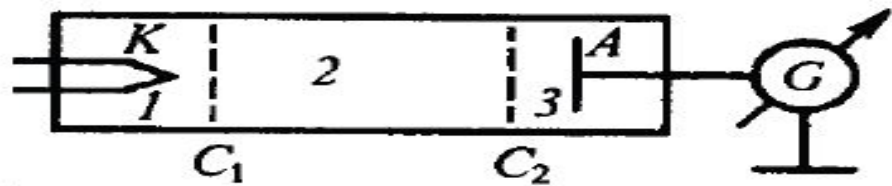
определяет **линейчатый спектр атома.**



#### 4. Опыты Франка и Герца.

В опытах Франка и Герца было экспериментально доказано существование в атомах стационарных состояний.

Электроны, эмитированные катодом  $K$ , разгоняются в области 1 под действием ускоряющей разности потенциалов  $\varphi$  между катодом и сеткой  $C_1$ . В области 2 электроны проходят через пары ртути и достигают анода  $A$ . Первое возбужденное состояние атома ртути имеет энергию 4,86 эВ. При увеличении ускоряющего потенциала  $\varphi$  до этой величины, соударения электронов с атомами становятся



неупругими: электрон отдает кинетическую энергию атому, возбуждая переход из основного энергетического состояния в первое возбужденное состояние (**поглощение** энергии атомами ртути) – ток в установке резко уменьшается. При дальнейшем увеличении  $\varphi$ , подобное же поведение тока наблюдается при энергиях, кратных  $\Delta E = 4,86$  эВ, когда электроны испытывают 2, 3, ... неупругих соударений. Таким образом, в атоме действительно существуют стационарные состояния (подтверждение первого постулата Бора).

Возбужденные атомы ртути, переходя в основное состояние, **излучают** кванты света с длиной волны  $\lambda = hc/\Delta E = 255\text{нм}$  (подтверждение второго постулата Бора).



## 5. Спектр атома водорода по Бору.

Рассмотрим движение электрона в водородоподобной системе, ограничиваясь круговыми стационарными орбитами. Второй закон Ньютона

$$\frac{Ze \cdot e}{4\pi\epsilon_0 r^2} = \frac{m_e v^2}{r} \quad (\text{другая форма: } \frac{m_e v^2}{2} = \frac{1}{2} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}) \quad \text{и условие квантование}$$

момента импульса:  $m_e v r_n = n\hbar$ , – позволяют получить радиус  $n$ -й стационарной орбиты электрона

$$r_n = n^2 \frac{\hbar^2 \cdot 4\pi\epsilon_0}{m_e Ze^2} \quad (n = 1, 2, 3, \dots).$$

**Для водорода** ( $Z = 1$ ) радиус первой орбиты электрона (**первый боровский радиус**)

$$a_0 = r_1 = \frac{\hbar^2 \cdot 4\pi\epsilon_0}{m_e e^2} = 5,28 \cdot 10^{-11} \text{ м.}$$

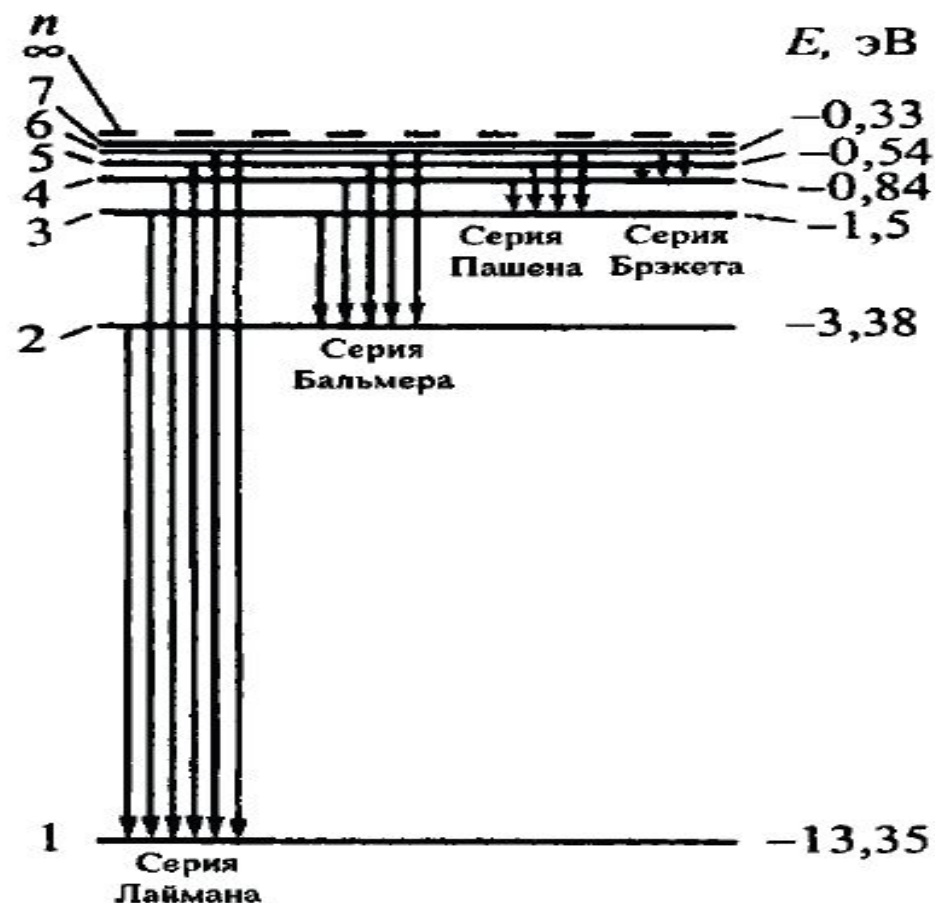
**Полная энергия электрона** в водородоподобной системе складывается из кинетической и потенциальной энергий

$$E = \frac{m_e v^2}{2} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{1}{2} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}.$$

и, с учетом квантования орбит  $r_n$ , получим

$$E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{Z^2 m_e e^4}{8h^2 \epsilon_0^2} \quad (n = 1, 2, 3, \dots),$$

где знак минус означает, что электрон находится в связанном состоянии.





Целое число  $n$ , определяющее энергетические уровни атома, называется **главным квантовым числом**. Энергетический уровень с  $n=1$  называется **основным (нормальным) уровнем**, а соответствующее ему состояние атома называется **основным (нормальным) состоянием**. Уровни с  $n>1$  и соответствующие им состояния называются **возбужденными**.

Придавая  $n$  целочисленные значения, получаем для атома водорода энергетические уровни, представленные на рисунке. Минимальная энергия атома водорода  $E_1 = -13,55$  эВ. Максимальная энергия  $E_\infty = 0$  при  $n = \infty$  называется **энергией ионизации** атома (при  $E = E_\infty$  происходит отрыв электрона от атома). Переход из стационарного состояния  $n$  в стационарное состояние  $m$  сопровождается испусканием кванта

$$h\nu = E_n - E_m = -\frac{m_e e^4}{8h^2 \varepsilon_0^2} \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) = hR \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad \text{где } R = \frac{m_e e^4}{8h^3 \varepsilon_0^2}.$$

Теоретическое значение  $R$  хорошо согласуется со значением постоянной Ридберга, определенным экспериментально.

Теория Бора сыграла огромную роль в создании атомной физики, в развитии атомной и молекулярной спектроскопии, но ее внутренняя противоречивость – соединение классических и квантовых представлений – не позволили на ее основе объяснить спектры многоэлектронных атомов (даже простейшего из них – атома гелия, содержащего помимо ядра два электрона).



## **Основные понятия квантовой механики**

### **6. Корпускулярно-волновой дуализм свойств вещества.**

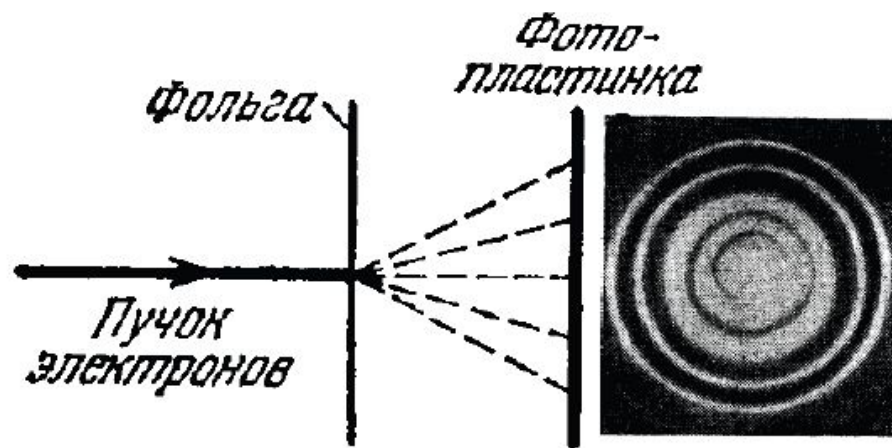
Квантовая механика, созданная для описания свойств квантовых объектов, основывается на предположении Луи де Бройля о том, что так же как свету присущи одновременно свойства частицы (корпускулы) и волны (двойственная корпускулярно-волновая природа света), так и ***электроны и любые другие частицы материи наряду с корпускулярными обладают также волновыми свойствами.***

Каждому объекту присущи как корпускулярные характеристики – ***энергия  $E$  и импульс  $p$*** , так и волновые характеристики – ***частота  $\nu$  и длина волны  $\lambda$*** .

Соотношения между корпускулярными и волновыми характеристиками частиц такие же как для фотонов:  $E = h\nu = \hbar\omega$  и  $p = h/\lambda$ .

Таким образом, любой частице, обладающей *импульсом* (в том числе и частице, в отличие от фотона, обладающей массой покоя), *сопоставляется волновой процесс* с длиной волны, определяемой по **формуле де Бройля**





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

Гипотеза де Бройля была подтверждена экспериментально в опытах по дифракции электронов на монокристаллах металлов – естественных дифракционных решетках – и на металлических пленках. Даже в случае чрезвычайно слабых

пучков, когда каждый электрон проходил препятствие независимо от других электронов пучка, формировалась дифракционная картина как в проходящем, так и в отраженном пучке электронов.

**Полная энергия частицы** определяется частотой волн де Бройля с помощью соотношения

$$E = h\nu.$$

Таким образом, *корпускулярно–волновой дуализм – универсальное свойство материи.*

Это свойство существенным образом проявляется только для **микрообъектов**. Для макроскопических тел длины волн де Бройля исчезающе малы (так, например, частице массой 1г, движущейся со скоростью 1м/с, соответствует длина волны де Бройля с  $\lambda = 6,62 \cdot 10^{-31}$  м) и волновыми эффектами пренебрегают.



## 7. Некоторые свойства волн де Бройля.

Рассмотрим свободно движущуюся со скоростью  $v$  частицу массой  $m$ .  
Фазовая скорость волн де Бройля

$$v_{\text{фаз}} = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar\omega}{\hbar k} = \frac{E}{p} = \frac{mc^2}{mv} = \frac{c^2}{v},$$

т.е. фазовая скорость волн де Бройля **больше** скорости света в вакууме (т.к.  $c > v$ ).

Использованы соотношения:  $E = \hbar\omega$ ,  $p = \hbar k$ ,  $k = \frac{2\pi}{\lambda}$  – волновое число.

Групповая скорость волн де Бройля

$$u = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d(\hbar\omega)}{d(\hbar k)} = \frac{dE}{dp}.$$

Для свободной частицы  $E = \sqrt{m^2c^4 + p^2c^2}$ , поэтому

$$u = \frac{dE}{dp} = \frac{pc^2}{\sqrt{m^2c^4 + p^2c^2}} = \frac{pc^2}{E} = \frac{mv c^2}{mc^2} = v.$$

Групповая скорость волн де Бройля **равна** скорости частицы. Иными словами, **волны де Бройля перемещаются вместе с частицей.**

Для фотона

$$v_{\text{фаз}} = \frac{E}{p} = \frac{mc^2}{mc} = c \quad \text{и} \quad u = \frac{pc^2}{E} = \frac{mcc^2}{mc^2} = c.$$



## 8. Соотношение неопределенностей.

Двойственная корпускулярно-волновая природа микрочастиц определяет еще одно необычное, с точки зрения классических представлений, свойство микрообъектов – *невозможно одновременно точно определить координату и импульс частицы.*

В самом деле, поскольку каждой частице соответствует волновой процесс, то неопределенность "местоположения" частицы порядка длины волны де Бройля  $\Delta x \approx \lambda$  и классическое понятие траектории теряет смысл. Для макроскопических объектов длины волн де Бройля исчезающе малы, поэтому для них применимо понятие траектории движения.

В общем случае это свойство микрообъектов называется соотношением неопределенностей Гейзенберга:

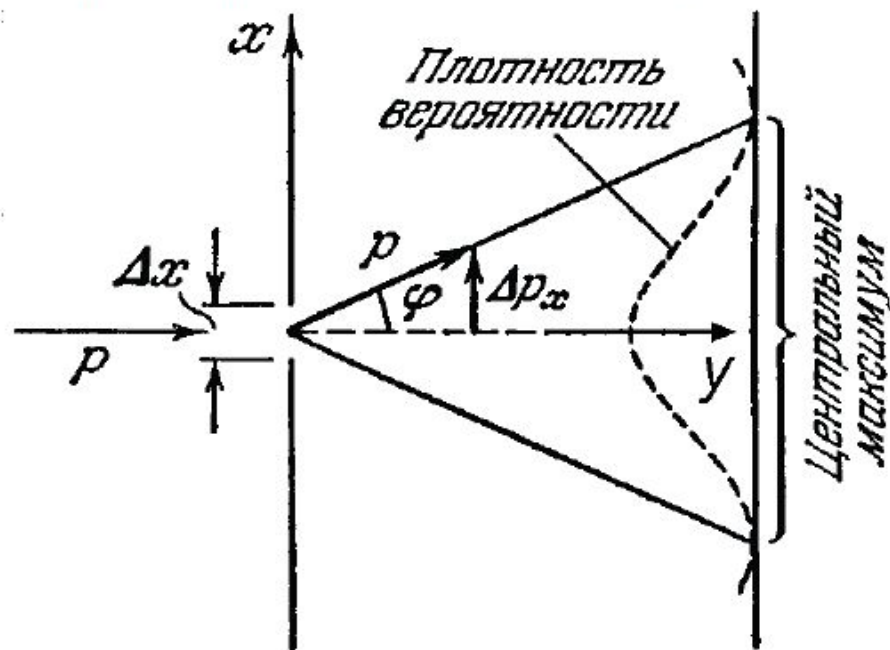


Микрочастица не может иметь одновременно определенную координату  $(x, y, z)$  и определенную соответствующую проекцию импульса  $(p_x, p_y, p_z)$ , причем неопределенности этих величин удовлетворяют соотношениям

$$\Delta x \Delta p_x \geq h, \quad \Delta y \Delta p_y \geq h, \quad \Delta z \Delta p_z \geq h,$$

т.е. произведение неопределенностей координаты и соответствующей ей проекции импульса не может быть меньше величины порядка  $h$ .

Соотношение неопределенностей проявляется в дифракции частиц. Пусть поток частиц движется вдоль оси  $Y$  с импульсом  $p$ . **До** прохождения частицы через щель составляющая ее импульса  $p_x = 0$ , так что  $\Delta p_x = 0$ , а координата



$x$  является совершенно неопределенной. **В момент** прохождения частицы через щель неопределенность координаты  $x$  частицы становится равной ширине щели  $\Delta x$ . Вследствие дифракции частицы будут двигаться в пределах угла  $2\varphi$ , где  $\varphi$  – угол, соответствующий первому дифракционному минимуму. Таким образом, неопределенность в значении составляющей вдоль оси  $x$



$\Delta p_x = p \sin \varphi = \frac{h}{\lambda} \sin \varphi$ . С другой стороны,  $\Delta x \sin \varphi = \lambda$  – условие первого

дифракционного минимума (стр.6-15). Следовательно  $\Delta x \Delta p_x = h$ . Поскольку часть частиц попадает за пределы первого дифракционного максимума, то получаем выражение  $\Delta x \Delta p_x \geq h$ , т.е. соотношение неопределенностей.

***Соотношение неопределенностей – квантовое ограничение применимости классической механики к микрообъектам.***

Для микрочастицы не существует состояний, в которых ее координаты и соответствующие им проекции импульса имели бы одновременно точные значения.

Для неопределенности энергии  $\Delta E$  некоторого состояния системы и промежутка времени  $\Delta t$ , в течение которого это состояние существует, также выполняется соотношение неопределенностей

$$\Delta E \Delta t \geq h.$$

Следовательно, система, имеющая среднее время жизни  $\Delta t$ , не может быть охарактеризована определенным значением энергии; разброс энергии  $\Delta E = h/\Delta t$  возрастает с уменьшением времени жизни системы и частота излученного фотона также должна иметь неопределенность  $\Delta \nu = \Delta E/h$ , т.е. спектральные линии должны иметь конечную ширину  $\delta \nu = \nu \pm \Delta E/h$ .



## 9. Волновая функция и ее свойства.

Интенсивность волн де Бройля в данной точке пространства связана с числом частиц, попавших в эту точку, о чем свидетельствуют опыты по дифракции микрочастиц. Поэтому волновые свойства микрочастиц требует статистического (вероятностного) подхода к их описанию

Для описания поведения квантовых систем вводится **волновая функция** (другое название – *пси-функция*)  $\Psi(x, y, z, t)$ . Она определяется таким образом, чтобы вероятность  $dw$  того, что частица находится в элементе объема  $dV$ , была равна

$$dw = |\Psi|^2 dV.$$



Физический смысл имеет не сама функция  $\Psi$ , а квадрат ее модуля  $|\Psi|^2 = \Psi\Psi^*$ , которым задается интенсивность волн де Бройля (здесь  $\Psi^*$  – функция, комплексно сопряженная с  $\Psi$ ). Величина  $|\Psi|^2$  имеет смысл **плотности вероятности**  $\rho_w$ , а сама волновая функция  $\Psi$  имеет смысл **амплитуды вероятности**. **Условие нормировки вероятностей** получается из того, что вероятность существования частицы где-либо в пространстве равна единице (интеграл вычисляется по всему бесконечному пространству).

$$\rho_w = \frac{dw}{dV} = |\Psi|^2$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi|^2 dV = 1$$



Волновая функция, характеризующая вероятность обнаружения действия микрочастицы в элементе объема должна быть **1) конечной** (вероятность не может быть больше единицы), **2) однозначной** (вероятность не может быть неоднозначной величиной) и **3) непрерывной** (вероятность не может изменяться скачком).

Волновая функция позволяет вычислить средние значения физических величин, характеризующих данный микрообъект. Например, среднее расстояние  $\langle r \rangle$  имеет вид:

Волновая функция удовлетворяет принципу суперпозиции: если система может находиться в различных состояниях, описываемых волновыми функциями  $\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_n, \dots$ , то она также может находиться в состоянии, описываемом линейной комбинацией этих функций (где  $C_n$  ( $n = 1, 2, \dots$ ) – произвольные, вообще говоря, комплексные числа).

$$\langle r \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} r |\Psi|^2 dV$$

$$\Psi = \sum_n C_n \Psi_n$$

Сложение волновых функций (амплитуд вероятностей), а не вероятностей (определяемых квадратами модулей волновых функций) принципиально отличает квантовую теорию от классической статистической теории, в которой для независимых событий справедлива *теорема сложения вероятностей*.



## 10. Общее уравнение Шредингера.

Основное уравнение нерелятивистской квантовой механики имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + U(x, y, z, t) \cdot \Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t},$$

где  $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ ;  $m$  – масса частицы;  $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$  – оператор Лапласа;

$i = \sqrt{-1}$  – мнимая единица;  $U(x, y, z, t)$  – потенциальная функция частицы в силовом поле, в котором она движется;  $\Psi(x, y, z, t)$  – искомая волновая функция частицы.

Уравнение дополняется условиями, накладываемыми на волновую функцию: (1) волновая функция должна быть конечной, однозначной и непрерывной; (2) производные  $\frac{\partial\Psi}{\partial x}$ ,  $\frac{\partial\Psi}{\partial y}$ ,  $\frac{\partial\Psi}{\partial z}$ ,  $\frac{\partial\Psi}{\partial t}$  должны быть непрерывны;

(3) функция  $|\Psi|^2$  должна быть интегрируема; это условие в простейших случаях сводится к условию нормировки вероятностей.



## 11. Уравнение Шредингера для стационарных состояний.

Важным частным случаем общего уравнения Шредингера, является уравнение Шредингера для стационарных состояний, в котором исключена зависимость  $\Psi$  от времени и, поэтому, **значения энергии** этих состояний являются **фиксированными** (не изменяются со временем).

В этом случае силовое поле, в котором движется частица, стационарно, т.е. функция  $U = U(x, y, z)$  не зависит явно от времени и имеет *смысл потенциальной энергии*. Решение уравнения может быть представлено в виде произведения двух функций – функции *только координат* и функции *только времени*  $\Psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z) \cdot \exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right)$ , где  $E$  – полная энергия частицы.

### Уравнение Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right) \cdot \Delta\psi + U \cdot \psi \cdot \exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right) = i\hbar\left(-i\frac{E}{\hbar}\right) \cdot \psi \cdot \exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right)$$



после упрощений приобретает вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + U\psi = E\psi \quad \text{или} \quad \Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\psi = 0$$

– уравнение Шредингера для стационарных состояний.

Физический смысл имеют только **регулярные** волновые функции – *конечные, однозначные и непрерывные вместе со своими первыми производными*. Эти условия выполняются только при определенном наборе  $E$ . Эти **значения энергии** называются **собственными**. Решения, которые соответствуют собственным значениям энергии, называются **собственными функциями**. Собственные значения  $E$  могут образовывать как непрерывный, так и дискретный ряд. В первом случае говорят о **непрерывном** (или **сплошном**) **спектре**, во втором – о **дискретном спектре**.



## 12. Движение свободной частицы.

Для свободной частицы  $U(x) = 0$  (пусть она движется вдоль оси  $x$ ).

Решением уравнения Шредингера 
$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \Psi = 0$$

будет функция 
$$\Psi(x, t) = A \exp(-i\omega t + ikx) = A \exp\left(-\frac{i(Et - p_x x)}{\hbar}\right),$$

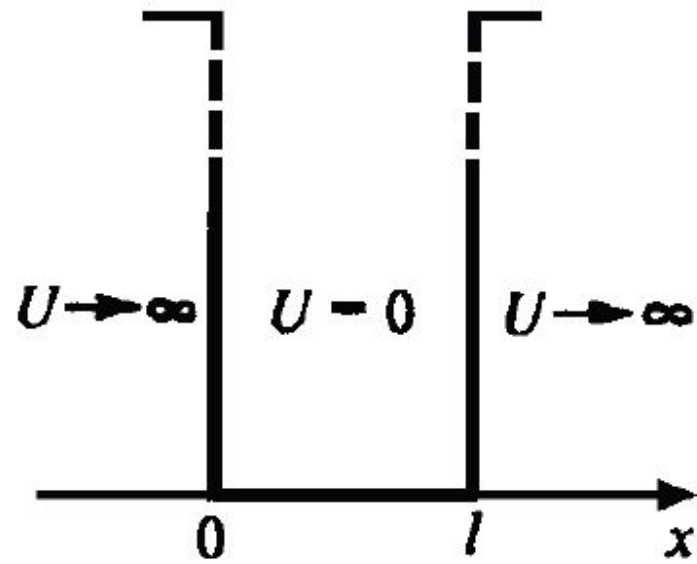
где  $A = const$ ,  $\omega = \frac{E}{\hbar}$ ,  $k = \frac{p_x}{\hbar}$  – волновое число – может принимать любые

положительные значения,  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{p_x^2}{2m}$  – **непрерывный** спектр энергий.

Таким образом, свободная квантовая частица описывается плоской монохроматической волной де Бройля. Этому соответствует не зависящая от времени плотность вероятности обнаружения частицы в данной точке пространства  $|\Psi|^2 = \Psi\Psi^* = |A|^2$ , т.е. все положения свободной частицы в пространстве являются равновероятными.



### 13. Частица в одномерной прямоугольной "потенциальной яме" с бесконечно высокими "стенками".



Рассмотрим одномерную "потенциальную яму"

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0 \\ 0, & 0 \leq x \leq l \\ \infty, & x > l \end{cases}$$

где  $l$  – ширина "ямы", а энергия отсчитывается от ее дна.

Уравнение Шредингера для стационарных состояний в пределах ямы

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi = 0 \quad \text{или} \quad \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + k^2 \psi = 0, \quad \text{где} \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}.$$

За пределы "ямы" частица не проникает, поэтому волновая функция вне "ямы" равна нулю, следовательно, на границах "ямы" непрерывная волновая функция также должна обращаться в нуль

$$\psi(0) = \psi(l) = 0.$$



Этим граничным условиям удовлетворяет решение уравнения Шредингера  $\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx$  при  $B = 0$  и  $k = \frac{n\pi}{l}$ . Поскольку  $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ , то

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ml^2} \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \text{ – собственные значения энергии.}$$

Минимально возможное значение энергии  $E_{\min} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2}$ .

Таким образом, энергия частицы в бесконечно высокой потенциальной "яме" принимает лишь определенные дискретные значения, т.е. **квантуется**.

Квантованные значения энергии  $E_n$  называются **уровнями энергии**, а число  $n$ , определяющее энергетические уровни частицы называется **главным квантовым числом**.



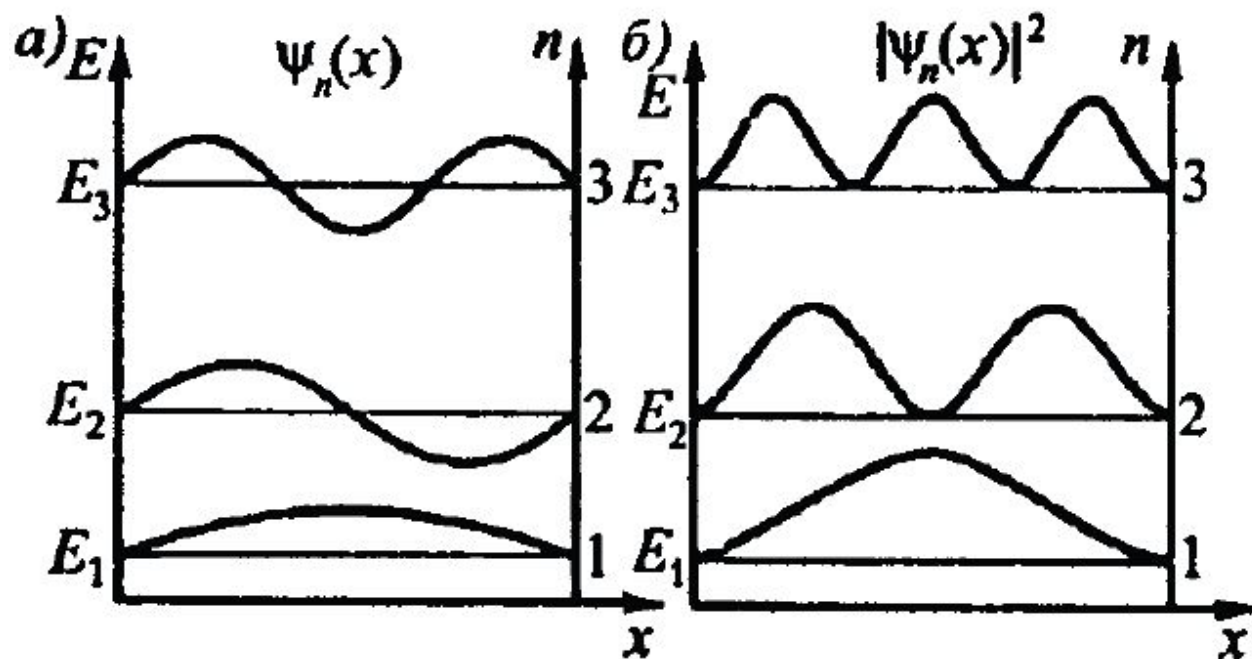
**Собственные волновые функции**  $\psi_n(x) = A \sin \frac{n\pi}{l} x$ , с учетом

нормировки  $\int_0^l \psi_n^2(x) dx = A^2 \int_0^l \sin^2 \frac{n\pi}{l} x dx = 1$ , будут иметь вид

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{n\pi}{l} x \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

На рисунке изображены графики собственных функций (а) и плотность вероятности (б) обнаружения частицы на разных расстояниях от "стенок" ямы, определяемая выражением

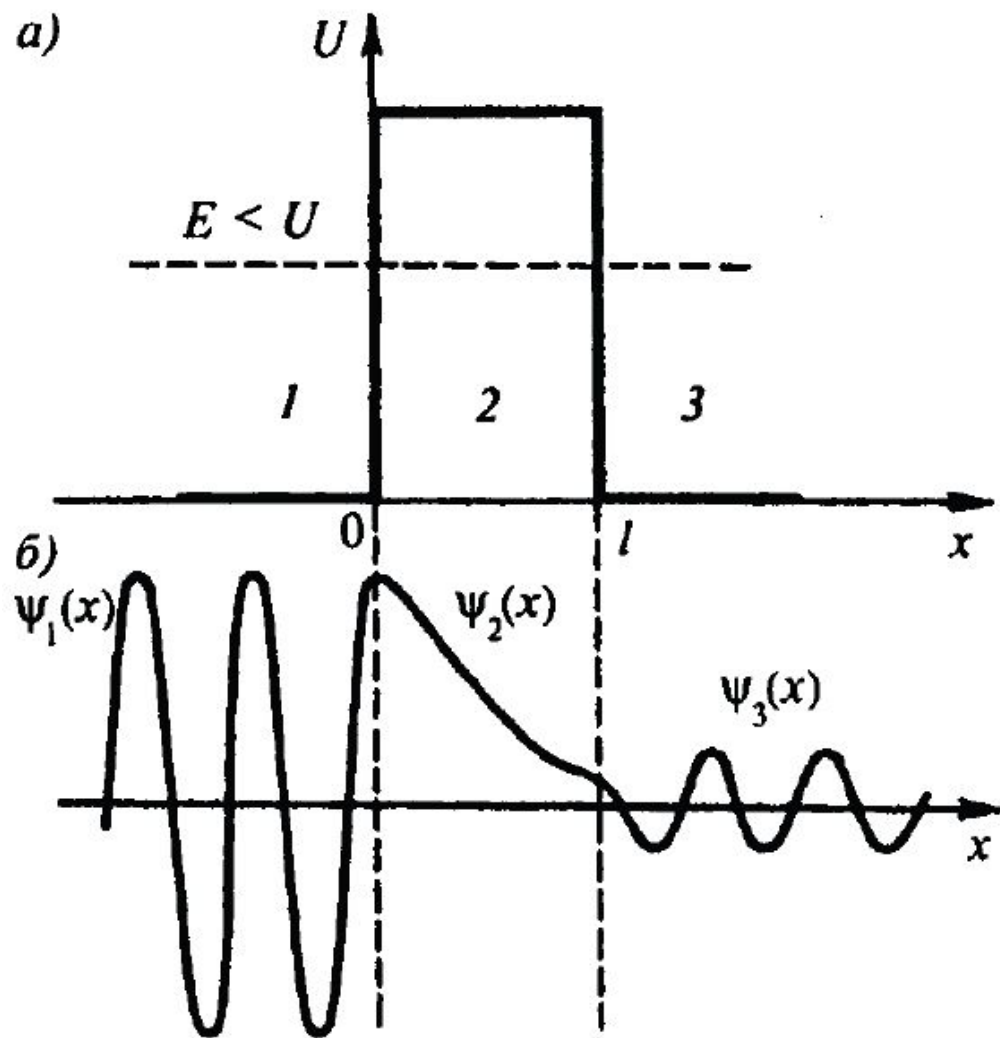
$$|\psi_n(x)|^2 = \psi_n(x) \psi_n^*(x).$$





## 14. Прохождение частицы через потенциальный барьер. Туннельный эффект.

Рассмотрим простейший потенциальный барьер прямоугольной формы (высота  $U$  и ширина  $l$ ) для одномерного движения частицы



$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 & (\text{область 1}) \\ U, & 0 \leq x \leq l & (\text{область 2}) \\ 0, & x > l & (\text{область 3}) \end{cases}$$

Вид волновых функций, являющихся решениями уравнения Шредингера для областей 1, 2 и 3 (см. рисунок и таблицу) свидетельствует о том, что:

- 1) **В области 1** волновая функция представляет собой сумму двух плоских волн – движущейся в сторону барьера и отраженной от барьера.
- 2) **В области 2** в случае  $E < U$ :



$$q = i\beta, \quad \text{где } \beta = \frac{\sqrt{2m(U - E)}}{\hbar}.$$

**3) В области 3** имеется только волна, прошедшая через барьер ( $B_3 = 0$ ), которая имеет вид волн де Бройля с той же длиной волны, но меньшей амплитудой.

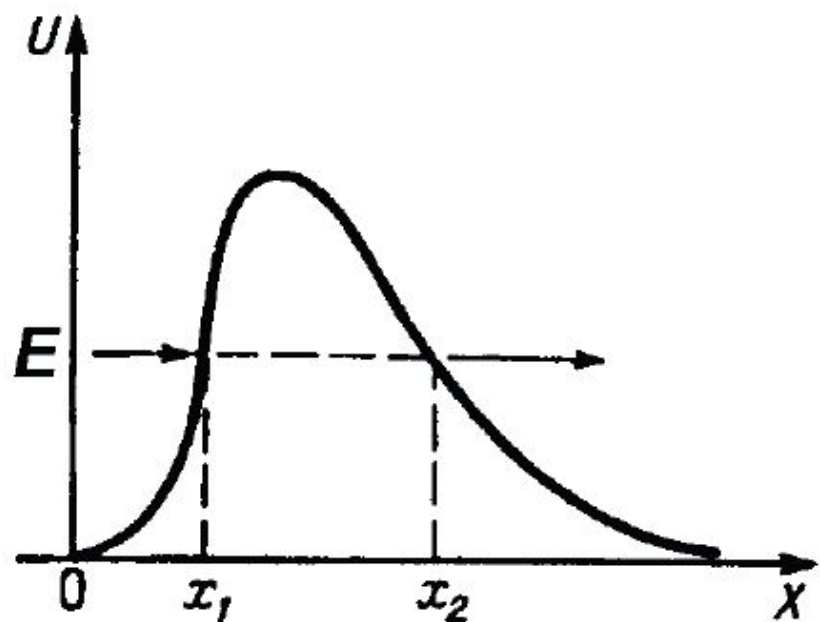
Об- ласть	Уравнение Шредингера	Общее решение	Решение при $E < U$
1	$\frac{\partial^2 \psi_1}{\partial x^2} + k^2 \psi_1 = 0,$	$\psi_1(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}$	$\psi_1(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}$
2	$\frac{\partial^2 \psi_2}{\partial x^2} + q^2 \psi_2 = 0,$	$\psi_2(x) = A_2 e^{iqx} + B_2 e^{-iqx}$	$\psi_2(x) = A_2 e^{-\beta x} + B_2 e^{\beta x}$
3	$\frac{\partial^2 \psi_1}{\partial x^2} + k^2 \psi_2 = 0,$	$\psi_3(x) = A_3 e^{ikx} + B_3 e^{-ikx}$	$\psi_3(x) = A_3 e^{ikx}$

$$\text{Здесь } k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad q^2 = \frac{2m(E - U)}{\hbar^2}.$$



Таким образом, квантовая механика приводит к принципиально новому специфическому квантовому явлению, получившему название **туннельного эффекта**, в результате которого микрообъект может "пройти" сквозь потенциальный барьер.

Для описания туннельного эффекта используют понятие **коэффициента прозрачности**  $D$  потенциального барьера, определяемого как отношение квадратов модулей прошедшей и падающей волны. Для случая **прямоугольного** потенциального барьера



$$D = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} = D_0 \exp\left(-\frac{2l}{\hbar} \sqrt{2m(U - E)}\right).$$

Для потенциального барьера произвольной формы

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



Прохождение частицы сквозь область, в которую, согласно законам классической механики, она не может проникнуть, можно пояснить *соотношением неопределенностей*. Неопределенность импульса  $\Delta p$  на

отрезке  $\Delta x = l$  составляет  $\Delta p > \frac{h}{l}$ . Связанная с этим разбросом в значениях

импульса кинетическая энергия  $\frac{(\Delta p)^2}{2m}$  может оказаться достаточной для того,

чтобы полная энергия частицы оказалась больше потенциальной.



## **15. Линейный гармонический осциллятор в квантовой механике.**

Линейный гармонический осциллятор – система, совершающая одномерное движение под действием квазиупругой силы, является моделью, которая часто используется при описании классических и квантовых систем.

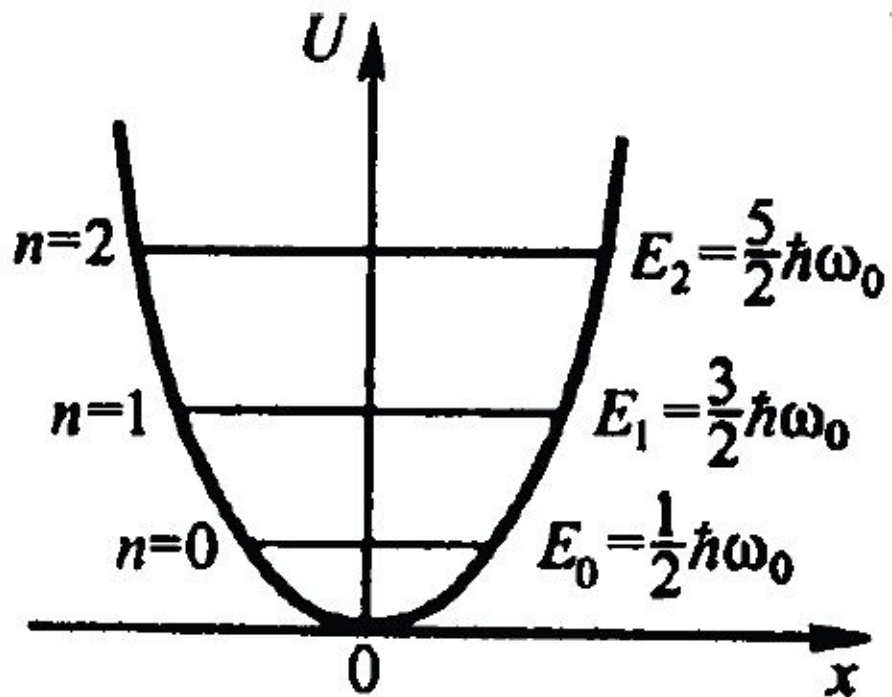
Пружинный, физический и математический маятники – примеры классических гармонических осцилляторов.

Потенциальная энергия гармонического осциллятора равна  $U = \frac{m\omega_0^2 x^2}{2}$ ,

где  $\omega_0$  – собственная частота колебаний осциллятора,  $m$  – масса частицы.

Классический осциллятор не может выйти за пределы "потенциальной ямы" с координатами  $-x_{\max} \leq x \leq +x_{\max}$ .

**Уравнение Шредингера** для стационарных состояний квантового осциллятора



$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E - \frac{m\omega_0^2 x^2}{2} \right) \cdot \psi = 0$$

где  $E$  – полная энергия осциллятора.

**Собственные значения** энергии для этого уравнения

$$E_n = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_0 \quad (n = 0, 1, 2, \dots)$$

Таким образом, энергия квантового осциллятора **квантуется** (может иметь лишь дискретные значения). Уровни энергии расположены на одинаковых расстояниях, равных  $\hbar\omega_0$ .

Минимальная энергия  $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega_0$  называется **энергией нулевых**



Минимальная энергия  $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega_0$  называется **энергией нулевых**

**колебаний.**

Существование энергии нулевых колебаний – типично квантовый эффект – прямое следствие соотношения неопределенностей.

Частица в яме любой формы не может находиться на ее дне, поскольку в нуль обращается импульс частицы и его неопределенность, а неопределенность координаты становится бесконечной, что противоречит, в свою очередь, условию пребывания частицы в "потенциальной яме".

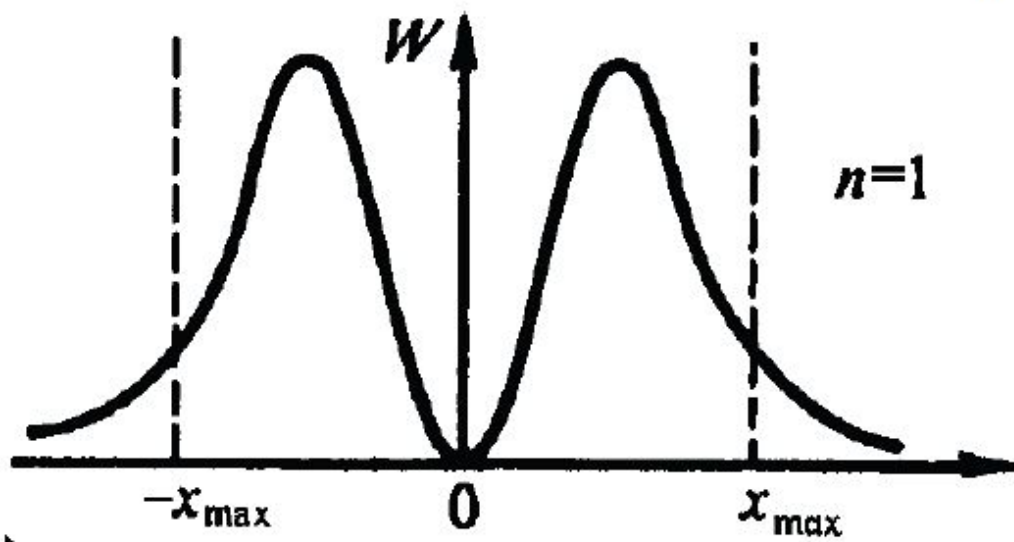
Правилами отбора в квантовой механике называются условия, накладываемые на изменения квантовых чисел.

Для гармонического осциллятора возможны лишь переходы между соседними подуровнями, т.е. переходы, удовлетворяющие **правилу отбора**

$$\Delta n = \pm 1.$$

Следовательно, энергия гармонического осциллятора может изменяться только порциями  $\hbar\omega$  и гармонический осциллятор испускает и поглощает энергию квантами.

Квантово-механическое решение задачи о квантовом осцилляторе показывает, что имеется отличная от нуля вероятность обнаружить частицу за пределами области  $-x_{\max} \leq x \leq +x_{\max}$ .



На рисунке приведена квантовая плотность вероятности обнаружения осциллятора при  $n=1$ , имеющая конечные значения для  $x \geq x_{\max}$ .