ЛЕКЦИЯ 8. ЭЛЕМЕНТЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Квантовая механика описывает законы движения и взаимодействия микрочастиц с учетом их волновых свойств.

8.1. Гипотеза де Бройля. Волны де Бройля

Корпускулярно-волновой дуализм (двойственность), характерный для электромагнитного излучения, присущ материи вообще. По современным представлениям не только фотоны, но и частицы вещества проявляют двойственность. Идея о волновых свойствах вещества принадлежит *де Бройлю* и высказана им в 1923 году.

По идее де Бройля движение микрочастицы (электрона, протона, нейтрона, атома, и т.д.) связано с волновым процессом, длина волны которого зависит от импульса частицы, так же как и в случае фотона. Де Бройль исходил из сложившихся к тому времени представлений о *корпускулярно-волновом дуализме света*: световая волна, частота которой ν за период колебаний $T = \dfrac{1}{\nu}$, распространяется на расстояние, равное длине волны: $\lambda = cT = \dfrac{c}{\nu}$. Используя это соотношение, выражение для импульса фотона можно записать в виде:

$$p_f = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}. \tag{8.1}$$

Де Бройль предположил, что соотношение (8.1) *универсально* и, следовательно, справедливо для волнового процесса, связанного с движущейся частицей. Таким образом, частице, обладающей импульсом *p*, соответствует волновой процесс, длина волны которого равна

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m\upsilon}, \tag{8.2}$$

где m – масса частицы; υ – скорость ее движения; h – постоянная Планка. Соотношение (8.2) принято называть *формулой де Бройля*, а волну, связанную с движущейся частицей, *волной де Бройля*.

Формула де Бройля может быть записана и в другой форме:

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE_{\text{к}}}}, \qquad (8.3)$$

где $E_{\text{к}} = \frac{m\upsilon^2}{2}$ – кинетическая энергия частицы. Учли, что $E_{\text{к}} = \frac{p^2}{2m} \Rightarrow p = \sqrt{2mE_{\text{к}}}$.

Запишем формулы, связывающие *корпускулярные свойства* (энергия и импульс) *и волновые характеристики микрочастиц* (частота (длина) волны). Формулы эти такие же что и для фотона:

$$E = h\nu = \hbar\omega; \qquad p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k,$$

где $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ – волновое число; $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ – постоянная Планка; $\omega = 2\pi\nu$ – циклическая частота.

Волны де Бройля обладают следующими свойствами:

1) *Фазовая скорость* волн де Бройля (для свободно движущейся со скоростью υ частицы массой *m*):

$$\upsilon_{\text{фаз}} = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar\omega}{\hbar k} = \frac{E}{p} = \frac{mc^2}{m\upsilon} = \frac{c^2}{\upsilon}, \qquad (8.4)$$

где υ – скорость движения частицы; $\upsilon_{\text{фаз}}$ – фазовая скорость волны де Бройля. Так как $c > \upsilon$, то *фазовая скорость волн де Бройля больше скорости света в вакууме.*

2) *Групповая скорость* волн де Бройля:

$$U = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d(\hbar\omega)}{d(\hbar k)} = \frac{dE}{dp} = \frac{d\left(\frac{p^2}{2m}\right)}{dp} = \frac{p}{m} = \frac{m\upsilon}{m} = \upsilon. \qquad (8.5)$$

Формула (8.5) выражает важный физический смысл: *групповая скорость волн де Бройля равна скорости частицы, т.е. волны де Бройля перемещаются вместе с частицей.*

3) Волны де Бройля испытывают *дисперсию*. Из выражения (8.4) следует, что

$$\upsilon_{\text{фаз}} = \frac{E}{p} = \frac{p}{2m} = \frac{\hbar k}{2m}, \tag{8.6}$$

т.е. *фазовая скорость зависит от длины волны (частоты)*, поскольку $k = \dfrac{2\pi}{\lambda}$ (учли, что $p = \hbar k$).

Возникает вопрос, если корпускулярно-волновой дуализм является общим свойством материи, то почему волновые свойства не обнаруживаются у макроскопических тел, например, у летящей пули? Ответ на этот вопрос связан с особенностью формулы де Бройля и всех других формул квантовой механики, содержащих постоянную Планка ($h = 6{,}62 \cdot 10^{-34}$ Дж $\cdot$ с).

Если в формулах квантовой механики нельзя пренебречь постоянной Планка, то мы всегда будем получать неклассические результаты. И наоборот, если в формулах можно считать, что $h \to 0$, то результаты квантовой механики совпадают с результатами механики Ньютона. В частности, для тел, масса которых несоизмеримо велика по сравнению с массой частиц вещества (атомов, молекул), можно считать, что $h \to 0$ и никаких волновых свойств у таких тел не обнаружится ($\lambda \to 0$).

Пример 1. Определим длину волны де Бройля для пули ($m = 10^{-3}$ кг), летящей со скоростью $\upsilon = 10^2$ м/с.

По формуле де Бройля

$$\lambda = \frac{h}{m\upsilon} = \frac{6{,}62 \cdot 10^{-34}\ \text{Дж} \cdot \text{с}}{10^{-3}\ \text{кг} \cdot 10^2\ \frac{\text{м}}{\text{с}}} = 6{,}62 \cdot 10^{-33}\ \text{м}.$$

Волна, имеющая такую длину волны, никаким опытом не может быть обнаружена. Поэтому считается, что *макроскопические тела* проявляют только одну сторону своих свойств – корпускулярную и не проявляют волновую.

Пример 2. Определим длину волны де Бройля для электрона ($m_e = 9{,}1 \cdot 10^{-31}$ кг), ускоренного в электрическом поле с разностью потенциалов $\Delta\varphi$ вольт. Заряд электрона равен $1{,}6 \cdot 10^{-19}$ Кл.

В электрическом поле электрон приобретает энергию

$$E_{\text{к}} = \frac{m\upsilon^2}{2} = e\Delta\varphi.$$

По формуле де Бройля (8.3) получим:

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE_\text{к}}} = \frac{h}{\sqrt{2m\Delta\varphi e}} = \frac{6{,}62 \cdot 10^{-34}}{\sqrt{\Delta\varphi}\sqrt{2 \cdot 9{,}1 \cdot 10^{-31} \cdot 1{,}6 \cdot 10^{-19}}} = \frac{12{,}25}{\sqrt{\Delta\varphi}} 10^{-10}\ \text{м}.$$

Таким образом, электрону, ускоренному в электрическом поле с разностью потенциалов $\Delta\varphi$, соответствует волна де Бройля с длиной волны

$$\lambda = \frac{12{,}25}{\sqrt{\Delta\varphi}} A^\circ,$$

где $\Delta\varphi$ – число, выражающее разность потенциалов в вольтах.

Например, электроны, ускоренные в электрическом поле с разностью потенциалов в 50 В, имеют длину волны де Бройля $\lambda = 1{,}73 A^\circ = 1{,}73 \cdot 10^{-10}\ \text{м} = 17{,}3\ \text{нм}$, т.е. того же порядка, что и волны рентгеновских лучей, используемых при исследовании структуры кристаллов. Волновые свойства летящих электронов были обнаружены в опытах при изучении их прохождения через тонкие пленки кристаллических веществ: наблюдалась дифракция, как и в случае рентгеновских лучей, что подтвердило гипотезу де Бройля о двойственности природы движущихся частиц.

Открытие волновых свойств микрочастиц привело к появлению и развитию новых методов исследования структуры вещества, как электронография, нейтронография. Возникла новая отрасль науки – электронная оптика.

Вывод: волновые свойства присущи микрочастицам, и можно описывать движение микрочастиц в виде волнового процесса, характеризующегося определенной длиной волны, рассчитываемой по формуле де Бройля.

8.2. Статистический смысл волн де Бройля

До сих пор говорилось, что движущиеся частицы обладают волновыми свойствами, и вопрос о природе этих волн не затрагивался. Волны де Бройля имеют специфическую природу, не имеющую аналогии среди волн, изучаемых в классической физике. Волны де Бройля – это не электромагнитные и не механические волны, распространяющиеся в среде! У них другая физическая природа.

Ранее было показано, что интенсивность электромагнитной волны (следовательно, и световой) пропорциональна квадрату ее амплитуды $I \sim E_0^2$. Введем величину, называемую *волновой функцией*, которая обозначается в квантовой механике буквой Ψ («пси»). Она является аналогом амплитуды E_0 в случае света. Дифракционная картина, которая наблюдается в опытах по рассеянию электронов и других частиц на кристаллах является проявлением статистической закономерности, согласно которой частицы попадают в определенные места, где интенсивность волны де Бройля оказывается наибольшей. *Квадрат модуля амплитуды волны де Бройля в данной точке является мерой вероятности того, что частица обнаруживается в этой точке*. Частицы не обнаруживаются в тех местах, где квадрат модуля амплитуды волны де Бройля или, как еще говорят, «волны вероятности», обращаются в нуль.

Если свободно движущейся частице, согласно идее де Бройля, сопоставляется плоская волна, то уравнение плоской волны де Бройля для свободной частицы, движущейся вдоль оси OX имеет вид:

$$\psi(x, t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(Et - px)} \tag{8.7}$$

(учтено, что в одномерном случае уравнение плоской волны имеет вид $\xi(x,t) = A\cos(\omega t - kx)$, или в комплексной записи $\xi(x,t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(Et - px)}$, а также формулы: $E = h\nu = \hbar\omega$; $p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k$).

8.3. Волновая функция и ее свойства

Положение частицы в пространстве в данный момент времени определяется в квантовой механике заданием *волновой функции* (пси-функции) $\psi(x, y, z, t)$ – *амплитуды вероятности*. Она – носитель информации о корпускулярных и волновых свойствах микрочастиц. Какими же свойствами обладает волновая функция?

1. Вероятность dW нахождения частицы в элементе объемом dV в момент времени t пропорциональна $|\psi|^2$ и элементу объема dV:

$$dW = |\psi|^2 dV, \tag{8.8}$$

где $|\psi|^2$ – квадрат модуля ψ-функции.

2. Квадрат модуля ψ-функции равен $|\psi|^2 = \psi\psi^*$, где ψ^* – функция комплексно сопряженная с ψ.

3. Квадрат модуля волновой функции имеет смысл *плотности вероятности* и определяет вероятность пребывания частицы в окрестности точки с координатами (*x*, *y*, *z*):

$$|\psi|^2 = \frac{dW}{dV} = \rho \qquad (8.9)$$

Отметим, что *физический смысл имеет не сама волновая функция* ψ, *а квадрат модуля* ψ*-функции*. Таким образом, если ψ-функция – это амплитуда вероятности, то интенсивность волн де Бройля определяется величиной $|\psi|^2$.

Вероятность найти частицу в момент времени *t* в конечном объеме *V* равна

$$W = \int_V dW = \int_V |\psi|^2 dV . \qquad (8.10)$$

4. Поскольку $|\psi|^2 dV$ – определяется как вероятность, то необходимо волновую функцию нормировать так, чтобы вероятность достоверного события обращалась в единицу по всему бесконечному пространству. Запишем условие *нормировки вероятности*:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dV = 1. \qquad (8.11)$$

Условие нормировки указывает на то, что пребывание частицы где-либо в пространстве есть достоверное событие и его вероятность должна быть равна единице, т.е. частица объективно существует во времени и в пространстве, и она заведомо будет где-нибудь обнаружена.

5. *Волновая функция* – объективная характеристика состояния микрочастиц и поэтому должна удовлетворять ряду ограничений: а) она должна быть *конечной* (вероятность не может быть больше единицы); б) *однозначной* (вероятность не может быть неоднозначной величиной); в) *непрерывной* и *иметь непрерывную первую производную* (вероятность не может изменяться скачком).

Таким образом, вероятность нахождения частицы в том или ином элементе объема не может быть величиной неоднозначной, бесконечной или скачкообразно меняющейся от точки к точке.

5. Волновая функция удовлетворяет *принципу суперпозиции:*

$$\psi = \sum_n c_n \psi_n \,. \tag{8.12}$$

Этот принцип означает, если какая-либо система (частица или их совокупность) может находиться в различных состояниях, описываемых волновыми функциями ψ_1, ψ_2, $\psi_3 \ldots \psi_n$, то она может находиться в состоянии ψ, описываемом линейной комбинацией этих функций. Здесь $c_n\ (n = 1, 2...)$ – произвольные комплексные числа, при этом $|c_n|^2$ – вероятность обнаружить, что система, представленная состоянием ψ может оказаться в состоянии ψ_n.

7. Волновая функция $\psi(x, y, z, t)$, являясь основной характеристикой состояния микрообъектов (атомов, молекул, элементарных частиц), позволяет в квантовой механике вычислять *средние значения* физических величин, характеризующих объект, находящийся в состоянии, описываемом волновой функцией ψ:

$$\langle L \rangle = \iiint L |\psi|^2 \, dxdydz \,, \tag{8.13}$$

где $\langle L \rangle$ – среднее значение величины L. Интегрирование проводится по координатам x, y и z от $-\infty$ до $+\infty$, т.е. по всему бесконечному пространству.

8.4. Соотношение неопределенностей Гейзенберга

Во многих случаях классические представления (например, в каждый момент времени частица занимает в пространстве строго определенное место (x, y, z) и обладает определенным импульсом) *неприменимы* для описания микрообъектов. *Гейзенберг* выдвинул идею о принципиальной невозможности характеризовать микрообъект одновременно и координатой и импульсом.

Согласно соотношению неопределенностей Гейзенберга *микрочастица не может иметь одновременно точных значений координаты* (x, y, z) *и соответствующих компонентов импульса* (p_x, p_y, p_z), причем неопределенности этих величин удовлетворяют условиям:

$$\Delta x \Delta p_x \geq \hbar \,;$$

$$\Delta y \Delta p_y \geq \hbar \,;$$

$$\Delta z \Delta p_z \geq \hbar; \qquad (8.14)$$

Таким образом, *произведение неопределенностей координаты и соответствующей ей проекции импульса не может быть меньше величины порядка* $\hbar$, где $\hbar = \dfrac{h}{2\pi} = 1{,}05 \cdot 10^{-34}$ Дж · с.

Физический смысл соотношения неопределенностей Гейзенберга: *для микрочастицы не существует состояний, в которых ее координаты и импульс имели бы одновременно точные значения*. То есть, если микрочастица находится в состоянии с точным значением координаты ($\Delta x = 0$), то в этом состоянии соответствующая ей составляющая импульса оказывается совершенно неопределенной ($\Delta p_x \to \infty$) и наоборот.

Можно записать соотношение неопределенностей Гейзенберга *для энергии и времени*

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar, \qquad (8.15)$$

где ΔE – неопределенность энергии некоторого состояния системы; Δt – промежуток времени, в течение которого существует это состояние.

Физический смысл соотношения неопределенности для энергии и времени: из-за конечности времени жизни атомов в возбужденном состоянии энергия возбужденных состояний атомов не является точно определенной, поэтому частота излученного фотона также должна иметь неопределенность $\Delta \nu = \dfrac{\Delta E}{\hbar}$. Тогда линии спектра должны иметь частоту $\Delta \nu = \pm \dfrac{\Delta E}{\hbar}$. Действительно, опыт показывает, что все спектральные линии размыты.

Таким образом, в квантовой механике показывается, что существует предел точности измерений, который не зависит от степени совершенства измерительного прибора, а носит принципиальный характер. Этот предел обусловлен двумя факторами: неизбежным взаимодействием измеряемого объекта и измеряющего прибора и двойственностью природы света и вещества. Невозможно произвести измерение, не внося возмущение в измеряемый объект. Например, мы ищем в темной комнате на ощупь мячик. Дотронувшись до него в темноте, мы обязательно его сдвинем. Если мы будем искать мячик с помощью фонарика, то, фотоны передадут ему свой импульс, что не приведет, конечно, к перемещению мячика, так как у него велика масса, но в случае микрообъектов этот импульс будет играть весьма существенную роль.

Роль двойственности природы света проявляется при попытке измерения положения электрона с помощью фотонов. Точность наблюдения не может превышать длины волны, т.е. неопределенность координаты $\Delta x \sim \lambda$. Чтобы увеличить точность измерения, нужно уменьшить длину волны, но в этом случае растет энергия фотона $\varepsilon = h\nu = hc/\lambda$. Эта энергия будет передаваться фотону и изменит его импульс. Таким образом, сам акт наблюдения вносит неопределенность либо в положение фотона, либо в импульс. Отметим, что соотношение неопределенностей Гейзенберга справедливо не только для электронов, но и для любых объектов. Они играют существенную роль в микромире, а в макромире оно не существенно, ввиду малости постоянной Планка.

Контрольные вопросы

1. Что изучает квантовая механика?

2. В чем заключается гипотеза де Бройля? Что представляет собой волна де Бройля, какова ее длина, фазовая и групповая скорость?

3. Запишите формулы, связывающие корпускулярные и волновые характеристики микрочастиц. Почему волновые свойства, присущие микрочастицам, не обнаруживаются у макроскопических тел? Приведите примеры.

4. Какова физическая природа волн де Бройля? Запишите уравнение плоской волны де Бройля.

5. Что такое волновая функция? Каков физический смысл волновой функции? Что определяет квадрат модуля волновой функции? Каковы ее свойства?

6. В чем заключается соотношение неопределенностей Гейзенберга? Каков их физический смысл?

7. Объясните физический смысл соотношения неопределенностей для энергии E и времени t: $\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar$.

Задачи

1. Заряженная частица, ускоренная разностью потенциалов $U = 500$ В имеет длину волны де Бройля $\lambda = 1{,}282$ пм. Принимая заряд этой частицы, равный заряду электрона $e = 1{,}6 \cdot 10^{-19}$ Кл, определите ее массу. [$m = 1{,}672 \cdot 10^{-27}$ кг].

2. Протон движется в однородном магнитном поле с индукцией B = 15 мТл по окружности радиусом R = 1,4 м. Определите длину волны де Бройля для протона. [0,197 пм].

3. Определите отношение неопределенностей скорости электрона, если его координата установлена с точностью до 10^{-5}м, и пылинки массой $m = 10^{-12}$ кг, если ее координата установлена с такой же точностью.[$\Delta\upsilon_e / \Delta\upsilon_л = 1{,}1 \cdot 10^{18}$].

4. Волновая функция $\Psi = A\sin(2\pi x/l)$ определена только в области $0 \le x \le l$. Используя условие нормировки, определите нормировочный множитель A. [$A = \sqrt{\frac{2}{l}}$].

ЛЕКЦИЯ 9. УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА И ЕГО ПРИЛОЖЕНИЯ

Основное уравнение классической механики – уравнение второго закона Ньютона $\vec{F} = m\frac{d^2\vec{r}}{dt^2}$. Это уравнение позволяет решить основную задачу классической механики: по данной силе, действующей на тело найти для любого момента времени координаты тела и его скорость, т.е. описать движение.

Сочетание корпускулярных и волновых свойств микрочастиц требует качественно нового подхода к описанию их движения. Уравнение движения микрочастицы – это волновое уравнение, из которого вытекают наблюдаемые на опыте волновые свойства частиц.

Волновое уравнение для микрочастицы, движущейся со скоростью $\upsilon << c$, сформулировано Э.Шредингером в 1926 г. Это уравнение не выводится, а постулируется. Правильность его подтверждается согласием с опытом, что придает ему характер закона природы.

9.1. Общее уравнение Шредингера

Временным (общим) уравнением Шредингера называется основное дифференциальное уравнение квантовой механики относительно волновой функции $\psi(x, y, z, t)$. Для микрочастицы, движущейся в силовом поле с потенциальной энергией $U(x, y, z, t)$ со скоростью $\upsilon << c$, где c – скорость света в вакууме, уравнение Шредингера имеет вид

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + U(x, y, z, t)\psi, \tag{9.1}$$

где Δ – оператор Лапласа ($\Delta\psi = \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}$); $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ – постоянная Планка; $i = \sqrt{-1}$ – мнимая единица; m - масса частицы; $\psi(x, y, z, t)$ – волновая функция частицы.

Уравнение Шредингера (9.1) дополняется условиями, накладываемыми на волновую функцию: 1) функция ψ 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. Последнее условие сводится к условию нормировки вероятностей, которое показывает, что при определенных условиях частица заведомо будет обнаружена, т.е. говорит об объективном существовании частицы во времени и пространстве.

9.2. Стационарное уравнение Шредингера

Если частица находится в определенном энергетическом состоянии с энергией $E = \text{const}$, то вероятность dW обнаружить ее в элементе объема dV не зависит от времени. Такое состояние частицы называется *стационарным состоянием* (состояние с фиксированными значениями энергии). Это возможно, если силовое поле в котором движется частица стационарно и функция $U = U(x, y, z)$ не зависит явно от времени

Решение общего уравнения Шредингера может быть представлено в виде произведения двух функций, одна из которых есть функция только координат, другая – только времени

$$\psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z) e^{-\frac{i}{\hbar}Et}, \tag{9.2}$$

где $\psi(x, y, z)$ – амплитуда волновой функции $\psi(x, y, z, t)$, E – полная энергия частицы.

Подставим решение уравнения Шредингера (9.2) в общее уравнение Шредингера (9.1)

$$i\hbar\left(-\frac{iE}{\hbar}\right)\psi e^{-\frac{i}{\hbar}Et} = -\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta\Psi)e^{-\frac{i}{\hbar}Et} + U\psi e^{-\frac{i}{\hbar}Et},$$

разделим на общий множитель $e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$ и после преобразований придем к уравнению относительно Ψ-функции

$$E\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + U\psi$$

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

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\psi = 0. \tag{9.3}$$

Уравнение (9.3) называется *стационарным уравнением Шредингера*.

В уравнение Шредингера в качестве параметра входит полная энергия E частицы. Реальный физический смысл имеют только такие решения, которые выражаются *собственными* волновыми функциями (конечными, однозначными и непрерывными вместе со своими первыми производными). Собственные функции существуют лишь при определенных значениях параметра E, называемых *собственными значениями энергии*. Совокупность собственных значений энергии E образует энергетический спектр частицы. Если $U \to 0$, то в области $E < 0$ собственные значения энергии образуют дискретный спектр. *Отыскание собственных значений энергии и собственных функций – важнейшая задача квантовой механики.*

9.3. Движение свободной частицы

Свободная частица – частица, движущаяся в отсутствии внешних полей. Так как на свободную частицу не действуют силы (пусть она движется вдоль оси x), то потенциальная энергия частицы $U = \mathrm{const}$ и ее можно принять равной нулю. Тогда полная энергия совпадает с ее кинетической энергией.

Установим для свободной частицы вид волновой функции и вид волнового уравнения. Из опытов по дифракции электронов вытекает, что микрочастица обладает волновыми свойствами плоской волны распространяющейся вдоль оси x

$$\xi(x,t) = Ae^{-i\left(\omega t - \frac{2\pi}{\lambda}x\right)} = A\left[\cos(\omega t - kx) - i\sin(\omega t - kx)\right]. \qquad (9.4)$$

Во внимание принимается только вещественная часть этого выражения. Согласно гипотезе де Бройля свободному движению частицы соответствует плоская волна с циклической частотой $\omega = 2\pi\nu = \frac{2\pi E}{h} = \frac{E}{\hbar}$ и длиной волны $\lambda = \frac{h}{p} = \frac{2\pi\hbar}{p}$. Подставим выражения для ω и λ в формулу (9.4)

$$\xi(x,t) = Ae^{-i\left(\frac{E}{\hbar}t - \frac{2\pi px}{2\pi\hbar}\right)} = Ae^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)}$$

и получим *волновую функцию для свободной частицы*, движущейся вдоль оси x:

$$\psi(x,t) = Ae^{-\frac{i}{\hbar}(Et-px)}. \tag{9.5}$$

Функция (9.5) представляет собой плоскую монохроматическую волну де Бройля.

Чтобы найти дифференциальное уравнение, которому удовлетворяет эта волновая функция, воспользуемся соотношением между энергией E и импульсом p ($E = \frac{p^2}{2m}$). Продифференцируем функцию (9.5) один раз по времени и два раза по координате x:

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}EAe^{-\frac{i}{\hbar}(Et-px)} = -\frac{i}{\hbar}E\psi; \tag{9.6}$$

$$\frac{\partial\psi}{\partial x} = \left(\frac{i}{\hbar}p\right)Ae^{-\frac{i}{\hbar}(Et-px)} = \frac{i}{\hbar}p\psi;$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = \left(\frac{i}{\hbar}p\right)^2 Ae^{-\frac{i}{\hbar}(Et-px)} = -\frac{1}{\hbar^2}p^2\psi. \tag{9.7}$$

Из выражения (9.6) следует, что

$$E = -\frac{\hbar \cdot i}{i \cdot i}\frac{1}{\psi}\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hbar i\frac{1}{\psi}\frac{\partial\psi}{\partial t}.$$

Из выражения (9.7) следует, что

$$p^2 = -\frac{\hbar^2}{\psi}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}.$$

Подставляя в соотношение $E = \frac{p^2}{2m}$ полученные из (9.6) и (9.7) выражения для E *и* p^2, получим дифференциальное уравнение

$$\hbar i\frac{1}{\psi}\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} \quad \text{или} \quad i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}, \tag{9.8}$$

решением которого является волновая функция (9.5): $\psi(x,t) = e^{-\frac{i}{\hbar}(Et-px)}$.

Это уравнение совпадает с общим уравнением Шредингера (9.1) при условии, что $U=0$. Покажем это. Представим волновую функцию $\psi(x,t)=e^{-\frac{i}{\hbar}(Et-px)}$ в виде произведения $\psi(x,t)=e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\psi(x)$ и подставим в полученное уравнение (9.8)

$$i\hbar\left(-\frac{i}{\hbar}E\right)\psi e^{-\frac{i}{\hbar}Et}=-\frac{\hbar^2}{2m}e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2},$$

разделим на общий множитель $e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$ и получим *уравнение Шредингера для свободной частицы, движущейся вдоль оси x*

$$E\psi=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\Rightarrow\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}E\psi=0. \tag{9.9}$$

Вывод: Таким образом, частным решением уравнения (9.9) $\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}E\psi=0$ является волновая функция $\psi(x,t)=Ae^{-\frac{i}{\hbar}(Et-px)}$ с *собственными значениями энергии*

$$E=\frac{p^2}{2m}=\frac{h^2}{\lambda^2}\frac{1}{2m}=\left(\frac{2\pi h}{2\pi\lambda}\right)^2\frac{1}{2m}=\frac{k^2\hbar^2}{2m} \tag{9.10}$$

(учли, что $p=\frac{h}{\lambda}$; $\frac{2\pi}{\lambda}=k$; $\frac{h}{2\pi}=\hbar$). Энергия свободной частицы может принимать любые значения (так как волновое число k может принимать любые положительные значения), т.е. *энергетический спектр* свободной частицы является *непрерывным*.

Таким образом, свободная квантовая частица описывается плоской монохроматической волной де Бройля. Плотность вероятности обнаружения частицы в той или иной точке пространства не зависит от времени и равна $|\psi|^2=\psi\psi^*=|A|^2$, т.е. все положения свободной частицы в пространстве являются равновероятными.

9.4. Частица в одномерной потенциальной «яме» бесконечной глубины

Рассмотрим движение микрочастицы вдоль оси x в силовом поле, определенном следующим образом:

$$U(x)=\begin{cases}0 \text{ при } 0 \le x \le l \\ \infty \text{ при } x<0,\, x>l\end{cases}. \tag{9.11}$$

График потенциальной энергии для этого случая носит название потенциальной «ямы» с бесконечно высокими «стенками», где l – ширина «ямы», а энергия отсчитывается от ее дна (рис. 9.1).

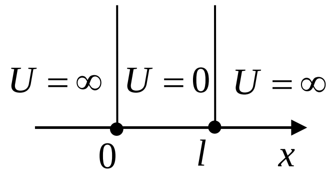

Рис. 9.1

Уравнение Шредингера для стационарных состояний в случае одномерной задачи

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\psi=0. \tag{9.12}$$

По условию задачи частица движется в ограниченном пространстве, т.е. не проникает за пределы «ямы». Значит, за пределами «ямы» вероятность ее обнаружения $|\psi|^2=0$ и сама волновая функция $\psi=0$. На границе «ямы» волновая функция тоже обращается в нуль (этого требует условие непрерывности). Следовательно, граничные условия имеют вид $\psi(0)=\psi(l)=0$.

В пределах «ямы» уравнение Шредингера (9.12) сведется к уравнению

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}E\psi=0 \quad (U=0) \quad \text{или} \quad \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+k^2\psi=0, \tag{9.13}$$

где $k^2=\dfrac{2m}{\hbar^2}E$ (см.соотношение 9.10). Уравнение (9.13) – это уравнение Шредингера для частицы, находящейся в потенциальной «яме». Общим решением этого уравнения является волновая функция

$$\psi(x)=A\sin kx. \tag{9.14}$$

Из условия непрерывности волновой функции следует, что $\psi(x)$ должна быть равна нулю на границах ямы, т.е. должно выполняться условие $\psi(l) = A\sin kl = 0$, что возможно лишь в случае, когда $kl = n\pi$, где n – целое число (n = 1, 2, 3…). Таким образом, необходимо, чтобы $k = \frac{n\pi}{l}$. Условиям на границах потенциальной «ямы» удовлетворяет целый набор собственных функций вида

$$\psi_n(x) = A\sin\frac{n\pi}{l}x, \tag{9.15}$$

которые соответствуют различным значениям числа n = 1, 2, 3…

Величину постоянной A можно найти из условия нормировки. Частица не может покинуть потенциальную яму, поэтому вероятность найти ее внутри ямы есть вероятность достоверного события и равна единице.

$$W = \int_0^l |\psi|^2 dx = 1, \tag{9.16}$$

где $|\psi|^2 dx = dW$ – вероятность найти частицу в интервале dx.

Вычислим величину интеграла (9.16). Для этого сделаем замену переменных

$$\varphi = \frac{n\pi}{l}x \Rightarrow d\varphi = \frac{n\pi}{l}dx \Rightarrow dx = \frac{l}{n\pi}d\varphi$$

и изменим пределы интегрирования: при $x = 0$, $\varphi = 0$; при $x = l$, $\varphi = \pi n$. Тогда условие нормировки (9.16) запишется в виде

$$\int_0^l |\psi(x)|^2 dx = \int_0^l A^2 \sin^2\frac{n\pi}{l}xdx = A^2\int_0^l \sin^2\frac{n\pi}{l}xdx = A^2\int_0^{n\pi}\left(\sin^2\varphi\right)\frac{l}{n\pi}d\varphi =$$

$$= \frac{A^2 l}{n\pi}\int_0^{n\pi}\left(\sin^2\varphi\right)d\varphi = \frac{A^2 l}{2n\pi}\int_0^{n\pi}(1-\cos 2\varphi)d\varphi = \frac{A^2 l}{2n\pi}\left[\int_0^{n\pi}d\varphi - \int_0^{n\pi}\cos 2\varphi d\varphi\right] =$$

$$= \frac{A^2 l}{2n\pi}\left[n\pi - \frac{1}{2}\sin 2\varphi\right]\Big|_0^{n\pi} = \frac{A^2 l}{2n\pi}\cdot n\pi = \frac{A^2 l}{2} = 1$$

(учли, что $\sin^2\varphi = \frac{1}{2}(1-\cos 2\varphi)$; $\int\cos axdx = \frac{1}{a}\sin ax$).

В результате интегрирования получим $\frac{A^2 l}{2} = 1 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{l}}$.

Итак, движение частицы в потенциальной «яме» с бесконечно высокими стенками может быть описано набором функций следующего вида:

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\frac{n\pi}{l} x, \tag{9.17}$$

где l – ширина ямы, а n = 1, 2, 3…($n = 0$ отпадает, т.к. при этом получается, что $\psi(x) = 0$ (внутри ямы), а это соответствует тому, что частица нигде не находится). Функции вида $\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\frac{n\pi}{l} x$ – это *собственные волновые функции* частицы, движущейся в силовом поле $U(x) = \begin{cases} 0 \text{ при } 0 \le x \le l \\ \infty \text{ при } x < 0,\ x > l \end{cases}$.

Ряду собственных волновых функций соответствует дискретный ряд собственных значений энергии E_n. Найдем собственные значения энергии E_n. Подставим собственную волновую функцию (9.17) $\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\frac{n\pi}{l} x$ в исходное уравнение Шредингера $\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\psi = 0$. Для этого найдем первую, а затем вторую производные от волновой функции $\psi(x)$:

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = -\sqrt{\frac{2}{l}} \frac{n\pi}{l} \cos\frac{n\pi}{l} x; \qquad \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\sqrt{\frac{2}{l}} \left(\frac{n\pi}{l}\right)^2 \sin\frac{n\pi}{l} x.$$

Подставив эти производные в уравнение Шредингера, получим следующее выражение

$$-\sqrt{\frac{2}{l}} \left(\frac{n\pi}{l}\right)^2 \sin\frac{n\pi}{l} x + \frac{2m}{\hbar^2} E \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\frac{n\pi}{l} x = 0.$$

После сокращения общих множителей получим равенство:

$$\frac{n^2 \pi^2}{l^2} = \frac{2m}{\hbar^2} E,$$

откуда следует, что собственные значения энергии определяются как

$$E_n = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} \text{ (n = 1, 2, 3…).} \tag{9.18}$$

Вывод: Стационарное уравнение Шредингера, описывающее движение частицы в потенциальной «яме» удовлетворяется целым рядом определенных собственных значений энергии частицы, зависящих от числа n = 1, 2, 3… . Следовательно, энергия частицы в потенциальной «яме», принимает только *определенные дискретные значения, т.е. квантуется*.

Квантованные значения энергии E_n называются *уровнями энергии частицы*, число n (1, 2, 3…), определяющее энергетические уровни частицы называется *главным квантовым числом*.

Таким образом, микрочастица в потенциальной «яме» может находиться только на определенном энергетическом уровне E_n или, как говорят, частица находится *в квантовом состоянии n*. Состояние частицы с наименьшей энергией называется *основным*, а остальные – *возбужденными*.

Собственные значения энергии E_n или уровни энергии принято изображать на графике прямыми горизонтальными линиями. Схема энергетических уровней изображена на рис. 9.2.

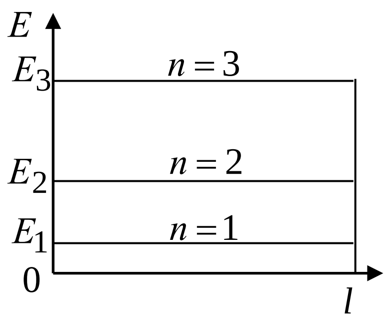

Рис. 9.2

Оценим разность энергий двух соседних уровней. Из выражения (9.18) следует, что энергетический интервал между соседними уровнями равен

$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}\left[2n+1\right] \approx \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}2n \Rightarrow \Delta E \approx \frac{\pi^2\hbar^2}{ml^2}n.$$

Пример 1: Для электрона при размерах ямы l порядка 10^{-1} м (свободные электроны в металлах), $\Delta E \approx 10^{-35} n$ Дж $\approx 10^{-16} n эВ$ ($1\,эВ = 1{,}6 \cdot 10^{-19}$ Дж), т.е. энергетические уровни расположены столь тесно, что будут восприниматься как *сплошной спектр* энергии. Таким образом, хотя квантование энергии имеет место, но на характере движения частицы оно сказываться не будет.

Пример 2: Если электрон движется в области атомарных размеров ($\sim 10^{-10}$ м), то

$$\Delta E \approx \frac{(3{,}14)^2 \cdot (1{,}05)^2 \cdot 10^{-68}}{10^{-30} \cdot 10^{-20}} \approx 10^{-17}\, n \text{ Дж} \approx 10^2\, n \text{ эВ},$$

В этом случае дискретность энергетических уровней будет проявляться весьма заметно. Соседние уровни энергии образуют *линейчатый спектр*.

Вывод: Разность энергий двух соседних уровней увеличивается с уменьшением массы частицы и ширины потенциальной ямы (области движения микрочастицы).

Графики собственных волновых функций (а) и кривые распределения плотности вероятности пребывания микрочастицы в разных местах отрезка l (б) приведены на рис. 9.3.

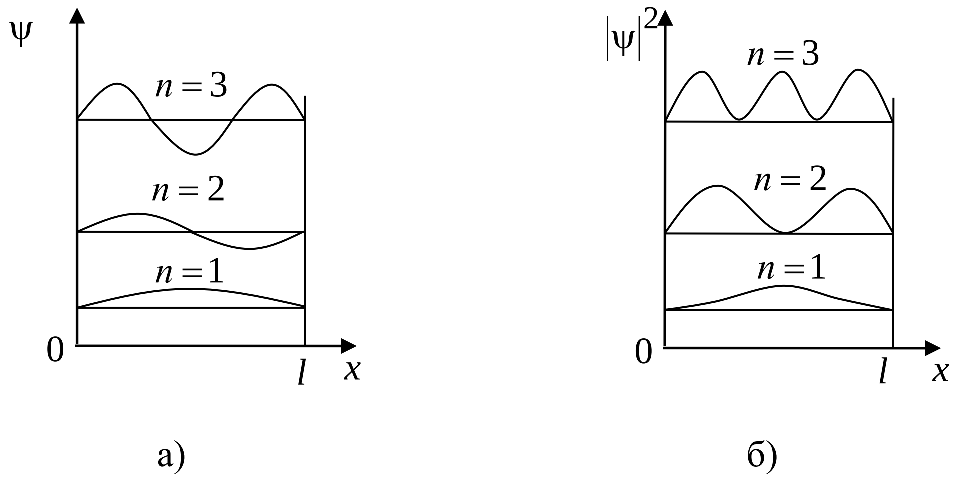

Рис. 9.3

Из рис. 9.3 видно, что вероятность пребывания микрочастицы в разных местах отрезка l неодинакова. Например, частица в квантовом состоянии с $n = 2$ не может быть обнаружена в середине потенциальной «ямы», но одинаково часто бывает как в левой, так и в правой половине «ямы». Следовательно, понятие траектории неприменимо к микрочастице.

С ростом n число максимумов на кривой распределения вероятности растет и при большом n становится настолько велико, что вероятность нахождения микрочастицы во всех местах отрезка l практически одна и та же, как для классической частицы. Если n велико, то можно говорить о практически непрерывной последовательности уровней энергии и характерная особенность квантовых процессов – дискретность – сглаживается. Этот результат является частным случаем *принципа соответствия Бора*, согласно которому выводы и законы квантовой механики при больших значениях квантовых чисел, должны соответствовать выводам и законам классической физики.

ЛЕКЦИЯ 10. УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА И ЕГО ПРИЛОЖЕНИЯ

10.1. Прохождение частицы сквозь потенциальный барьер. Туннельный эффект

Рассмотрим простейший потенциальный барьер прямоугольной формы для одномерного движения частицы (рис. 10.1)

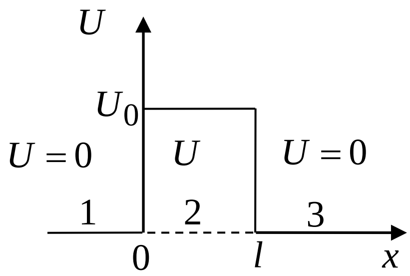

Рис. 10.1

Потенциальная энергия U принимает следующие значения

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

Классическая частица беспрепятственно пройдет над барьером (при $E>U$), либо отразиться от него (при $E<U$) и будет двигаться в обратную сторону, т.е. она не может проникнуть сквозь барьер. Для микрочастицы, даже при $E>U$, имеется отличная от нуля вероятность, что частица отразиться от барьера и будет двигаться в обратную сторону. При $E<U$ имеется также отличная от нуля вероятность, что частица окажется в области $x>l$, т.е. проникнет сквозь барьер. Эти выводы следуют из уравнения Шредингера, описывающего движение микрочастицы при условиях данной задачи.

Рассмотрим случай, когда *энергия частицы больше высоты потенциального барьера* $E>U_0$ (рис. 10.2). Стационарное уравнение Шредингера для каждой из трех областей может быть записано в виде

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-U_0(x)\right]\psi=0, \tag{10.1}$$

где U_0 – высота потенциального барьера; E – полная энергия частицы; m – масса частицы.

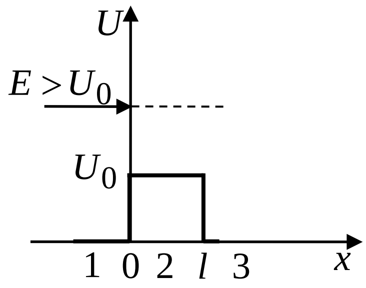

Рис. 10.2

В областях 1 и 3 уравнение Шредингера имеет вид:

$$\frac{\partial^2\psi_{1,3}}{\partial x^2}+k^2\psi_{1,3}=0 \tag{10.2}$$

(для областей 1 и 3 введем обозначение : $\frac{2m}{\hbar^2}E=k^2$).

Для области 2 уравнение Шредингера имеет вид:

$$\frac{\partial^2\psi_2}{\partial x^2}+q^2\psi_2=0 \tag{10.3}$$

(для области 2 введем обозначение: $\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-U_0\right)=q^2$).

Общие решения этих дифференциальных уравнений:

для области 1 $\qquad \psi_1(x)=A_1e^{ikx}+B_1e^{-ikx};$ (10.4)

для области 2 $\qquad \psi_2(x)=A_2e^{iqx}+B_2e^{-iqx};$ (10.5)

для области 3 $\qquad \psi_3(x)=A_3e^{ikx}+B_3e^{-ikx}.$ (10.6)

В частности, для области 1 полная волновая функция будет иметь вид

$$\psi_1(x,t)=\psi_1(x)e^{-\frac{i}{\hbar}Et}=Ae^{-\frac{i}{\hbar}(Et-p_1x)}+Be^{-\frac{i}{\hbar}(Et+p_1x)} \tag{10.7}$$

(учли, что импульс p и волновое число k связаны соотношением: $p=k\hbar$).

В этом выражении первое слагаемое – это плоская волна, распространяющаяся в положительном направлении оси x (соответствует частице, движущейся в сторону барьера), а второе – волну, распространяющуюся в противоположном направлении, т.е. отраженную от барьера (соответствует частице, движущейся от барьера налево). Решение (10.6) содержит волны, распространяющиеся в обе стороны, однако в области 3 имеется только прошедшая барьер волна, распространяющаяся слева направо. Поэтому коэффициент B_3 в формуле (10.6) следует принять равным нулю.

Вывод: В случае $E>U_0$ волна на границе областей 1 и 2 частично отражается ($B_1\neq 0$) и частично проходит в область 2, затем она на границе областей 2 и 3 частично отражается ($B_2\neq 0$), частично проходит в область 3.

Рассмотрим теперь случай, когда *энергия частицы меньше высоты потенциального барьера* $E<U_0$ (рис. 10.3). Этот случай представляет особый интерес, поскольку законы классической физики не разрешают частице проникнуть сквозь барьер.

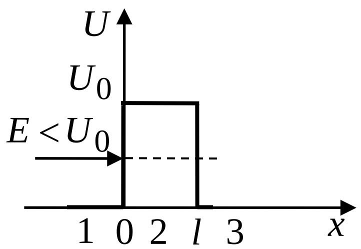

Рис. 10.3

В области 1 и 3 уравнение Шредингера имеет вид:

$$\frac{\partial^2\psi_{1,3}}{\partial x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}E\psi_{1,3}=0 \qquad \text{или} \qquad \frac{\partial^2\psi_{1,3}}{\partial x^2}+k^2\psi_{1,3}=0. \tag{10.8}$$

В области 2 уравнение Шредингера имеет вид:

$$\frac{\partial^2\psi_2}{\partial x^2}+q^2\psi_2=0 \tag{10.9}$$

($q = i \cdot \beta$ – *мнимое число*, где $\beta = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E)}$)

Учитывая значение q и B_3=0, получим решения уравнения Шредингера для трех областей в следующем виде:

для области 1 $$\psi_1(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}; \qquad (10.10)$$

для области 2 $$\psi_2(x) = A_2 e^{-\beta x} + B_2 e^{\beta x}; \qquad (10.11)$$

для области 3 $$\psi_3(x) = A_3 e^{ikx}. \qquad (10.12)$$

В области 2 функция (10.11) уже не соответствует плоским волнам, распространяющимся в обе стороны, поскольку показатели экспонент не мнимые, а действительные. Расчеты показывают, что для частного случая широкого и высокого барьера B_2 = 0.

Качественный характер функций $\psi_1(x)$, $\psi_2(x)$ и $\psi_3(x)$ иллюстрируется на рис. 10.4.

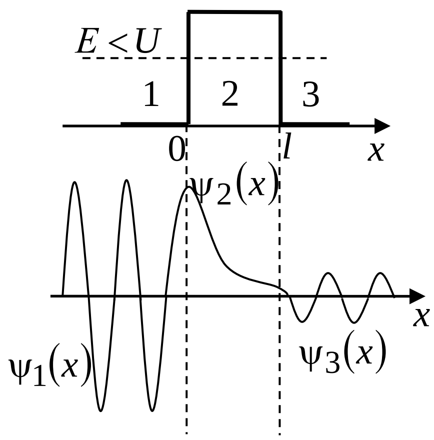

Рис. 10.4

Волновая функция не равна нулю внутри барьера, а в области 3, если барьер не очень широк, будет опять иметь вид волн де Бройля с тем же импульсом (той же частотой), но с меньшей амплитудой. Следовательно, частица имеет отличную от нуля вероятность прохождения сквозь потенциальный барьер конечной ширины.

Вывод: В случае $E < U_0$, согласно квантовой механике, микрочастица может «пройти» сквозь потенциальный барьер. Это специфическое квантовое явление получило название *туннельного эффекта.*

Для описания туннельного эффекта используют понятие *коэффициента прозрачности D потенциального барьера* (вероятность проникновения сквозь потенциальный барьер конечной ширины):

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - E)}\,l \right), \tag{10.13}$$

где U_0 – высота потенциального барьера; E – энергия частицы; l – ширина барьера; m – масса частицы; $\hbar = \dfrac{h}{2\pi}$ – постоянная Планка; $D_0 = const \approx 1$ – постоянный множитель.

Из формулы (10.13) следует, что D сильно зависит от массы m частицы, ширины барьера l и от разности (U_0 – E); чем шире барьер, тем меньше вероятность прохождения сквозь него частицы.

Вывод: Подъбарьерное прохождение и надъбарьерное отражение – это специфические квантовые эффекты, связанные *с волновыми свойствами* частиц.

Туннельное прохождение сквозь потенциальный барьер лежит в основе многих явлений физики твердого тела (например, явления в контактном слое на границе двух полупроводников), атомной и ядерной физики (например, α-распад, протекание термоядерных реакций).

10.2. Гармонический линейный осциллятор в квантовой механике

Линейным гармоническим осциллятором называется частица с массой m, которая колеблется с собственной циклической частотой ω_0 вдоль некоторой оси x под действием квазиупругой силы F, пропорциональной отклонению x частицы от положения равновесия: $F = -kx$, где k – коэффициент квазиупругой силы: $k = m\omega_0^2 \Rightarrow \omega_0 = \sqrt{\dfrac{k}{m}}$ - циклическая частота колебаний. Классическими гармоническими осцилляторами являются пружинные, физические и математические маятники.

Потенциальная энергия гармонического осциллятора равна $U = \dfrac{kx^2}{2} = \dfrac{m\omega_0^2 x^2}{2}$.

В *квантовой* механике колебания гармонического осциллятора – *квантового осциллятора* – описываются уравнением Шредингера вида

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-\frac{m\omega_0^2x^2}{2}\right)\psi=0\,. \qquad (10.14)$$

Решением такого уравнения является функция

$$\psi(x)=e^{-ax^2}, \qquad (10.15)$$

где a – некоторая постоянная.

Знание волновой функции позволяет найти полную механическую энергию квантового осциллятора. Для нахождения собственных значений энергии квантового осциллятора продифференцируем дважды волновую функцию (10.15):

$$\frac{d\psi}{dx}=-2axe^{-ax^2};$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}=-2a\cdot e^{-ax^2}+(-2ax)\cdot(-2ax)e^{-ax^2}=\left(-2a+4a^2x^2\right)e^{-ax^2}$$

и подставим полученные значения в уравнение (10.14):

$$\left(-2a+4a^2x^2\right)e^{-ax^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-\frac{m\omega_0^2x^2}{2}\right)e^{-ax^2}=0;$$

После сокращения на общий множитель e^{-ax^2} получим выражение

$$-2a+4a^2x^2=-\frac{2m}{\hbar^2}E+\frac{m^2\omega_0^2x^2}{\hbar^2}.$$

Приравняем коэффициенты при x^2 и получим, что $4a^2=\frac{m^2\omega_0^2}{\hbar^2}$, откуда $a=\frac{m\omega_0}{2\hbar}$. Приравняем свободные члены: $-2a=-\frac{2m}{\hbar^2}E$. Очевидно, что

$$E=\frac{a\hbar^2}{m}=\frac{m\omega_0}{2\hbar}\frac{\hbar^2}{m}=\frac{\omega_0\hbar}{2}=\frac{2\pi\hbar\nu}{2}=\frac{1}{2}h\nu\,. \qquad (10.16)$$

Вывод: Уравнение Шредингера (10.14) имеет однозначные, конечные и непрерывные решения только при собственных значениях энергии квантового осциллятора

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_0, \tag{10.17}$$

где n = 0, 1, 2, 3…

Эта формула показывает, что энергия квантового осциллятора может принимать только дискретные значения, т.е. квантуется. *Минимальное значение энергии* $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega_0$ называется *энергией нулевых колебаний*.

Наличие энергии нулевых колебаний означает, что частица не может находиться на дне потенциальной «ямы» независимо от ее формы. Это прямое следствие соотношений неопределенностей Гейзенберга: падение на дно «ямы» связано с обращением в нуль импульса частицы, а вместе с ним и его неопределенности. Тогда неопределенность координаты становится сколь угодно большой, что противоречит пребыванию частицы в потенциальной яме. Таким образом, полная энергия гармонического осциллятора в микромире является *квантованной* величиной. Энергии, которыми может обладать осциллятор, называют *энергетическими уровнями*, которые расположены на одинаковых расстояниях друг от друга. Это следует из формулы (10.16). Вычислим расстояние между соседними энергетическими уровнями:

$$E_{n+1} - E_n = \left(n + 1 + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_0 - \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_0 = \hbar\omega_0 = h\nu. \tag{10.18}$$

Полученный результат согласуется с гипотезой Планка, согласно которой, атомные осцилляторы излучают энергию не непрерывно, а порциями – квантами, причем энергия кванта пропорциональна частоте колебаний. Следовательно, излучение кванта энергии гармонического осциллятора происходит при переходе с одного энергетического уровня (n+1) на соседний n .

Строгое решение задачи о квантовом осцилляторе приводит к значительному отличию от классического рассмотрения: имеется отличная от нуля вероятность, обнаружить частицу в той области, которая является запрещенной с точки зрения классической механики. Этот результат демонстрируется на рис. 10.5, где приводятся кривые распределения плотности вероятности $|\psi(x)|^2$ для различных состояний квантового осциллятора и, соответствующие этим квантовым состояниям уровни энергии E_n; 1) – потенциальная «яма» для классического гармонического осциллятора (классически дозволенная область) и 2) – область, запрещенная классической механикой.

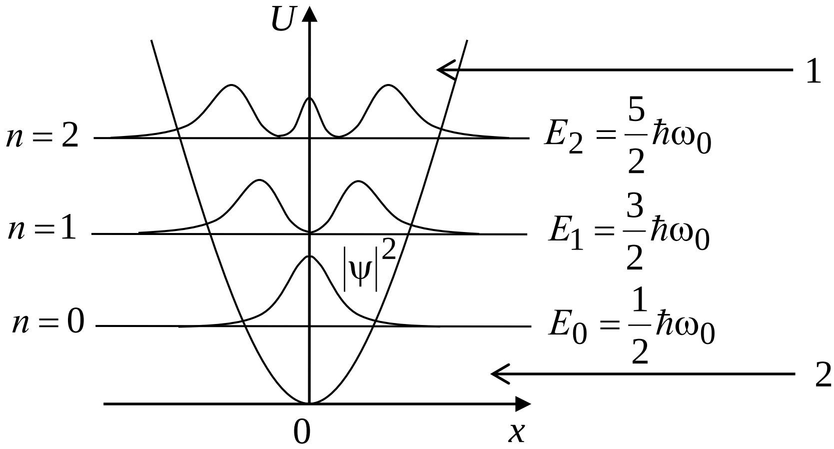

Рис. 10.5

Существование отличных от нуля значений $|\psi(x)|^2$ за пределами потенциальной «ямы» объясняется возможностью прохождения микрочастиц сквозь потенциальный барьер.

Самая низкая энергия ($n = 0$) равна $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$. Иначе говоря, квантовая механика утверждает, что гармонический осциллятор всегда обладает энергией, т.е. колебания атомов не прекращаются никогда, даже при температуре абсолютного нуля. Вспомним, что согласно классической физике, при $T = 0$, энергия колебательного движения атомов кристалла должна была бы обращаться в нуль, поскольку $W = \frac{ikT}{2}$, где i – число степеней свободы; k – постоянная Больцмана; T – абсолютная температура.

Контрольные вопросы

1. Запишите временное (общее) уравнение Шредингера. Что является его решением? Какими условиями, накладываемыми на волновую функцию, дополняется уравнение Шредингера?

2. Какое состояние частицы называется стационарным? Запишите стационарное уравнение Шредингера.

3. Что такое свободная частица? Каков вид волновой функции и волнового уравнения для свободной частицы, движущийся вдоль оси x?

4. Какие значения может принимать энергия свободной частицы? Что представляет собой энергетический спектр частицы?

5. Что такое «потенциальная яма»? Какова наименьшая энергия частицы, находящейся в «потенциальной яме» с бесконечно высокими стенками?

6. Что такое туннельный эффект? Какими свойствами микрочастиц обусловлен туннельный эффект?

7. Запишите стационарное уравнение Шредингера для линейного гармонического осциллятора в квантовой механике. Какие значения принимает энергия квантового осциллятора? Чему равна энергия нулевых колебаний гармонического осциллятора?

Задачи

1. Больше или меньше энергия частицы, находящейся в «потенциальной яме» с бесконечно высокими стенками, в состоянии $n = 3$ по сравнению с состоянием $n = 1$? Во сколько раз?

2. Электрон находится в одномерной прямоугольной потенциальной яме, шириной $l = 200$ пм с бесконечно высокими стенками в возбужденном состоянии ($n = 4$) . Определить: 1) минимальную энергию электрона; 2) вероятность W обнаружения электрона в первой четверти «ямы». Изобразите графически плотность вероятности обнаружения электрона в данном состоянии. [$E_{\min}$=9,37 эВ; $W = 0,25$].

3. Чему равна разность энергий между четвертым и вторым энергетическими уровнями квантового осциллятора?