

# ЛЕКЦИЯ 11

## ПЛАН ЛЕКЦИИ

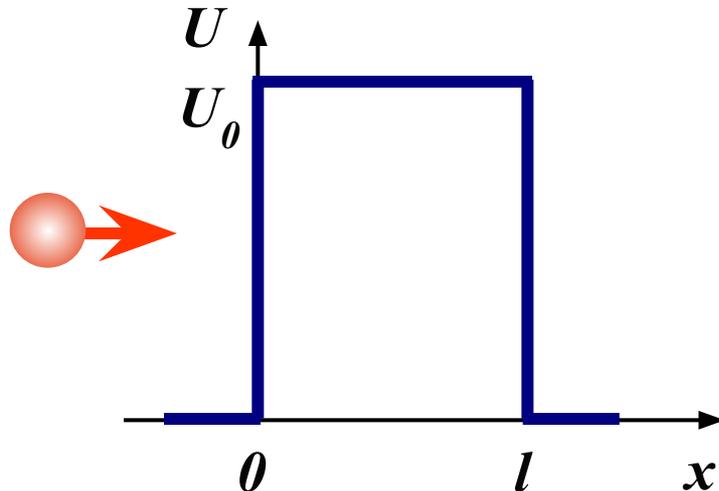
1. Примеры решения квантовых задач:
  - туннельный эффект.
2. Качественная модель атома водорода в квантовой физике.
3. Уравнение Шредингера для водородоподобного атома.  
Квантовые числа.

# ПРОХОЖДЕНИЕ ЧАСТИЦЫ ЧЕРЕЗ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ БАРЬЕР

## Определения.

Область пространства, в которой на частицу действует *тормозящая сила* и потенциальная энергия увеличивается, называется *потенциальным барьером*.

Разность потенциальных энергий частицы на границах потенциального барьера называется *высотой потенциального барьера*.

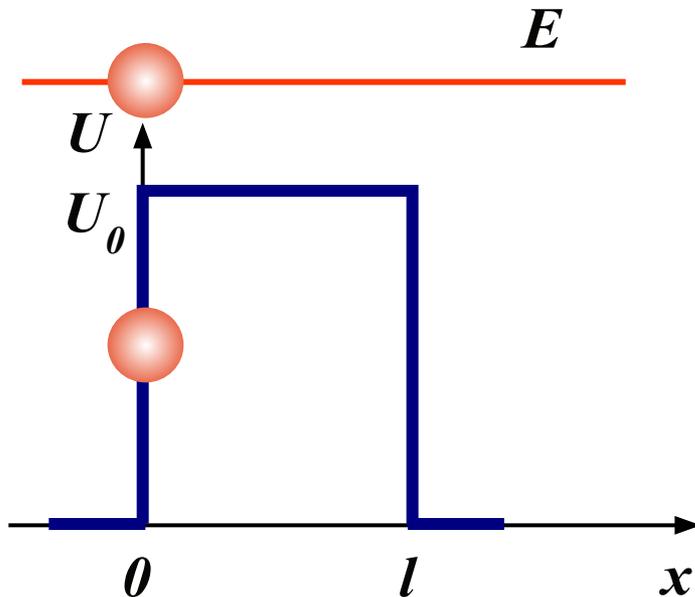


Пусть частица движется слева направо по оси  $x$  и встречает на своем пути прямоугольный потенциальный барьер высотой  $U_0$  и шириной  $l$ .

# ПРОХОЖДЕНИЕ ЧАСТИЦЫ ЧЕРЕЗ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ БАРЬЕР

## Классические представления о поведении частицы.

1.  $E > U_0$ . Частица беспрепятственно проходит над барьером.



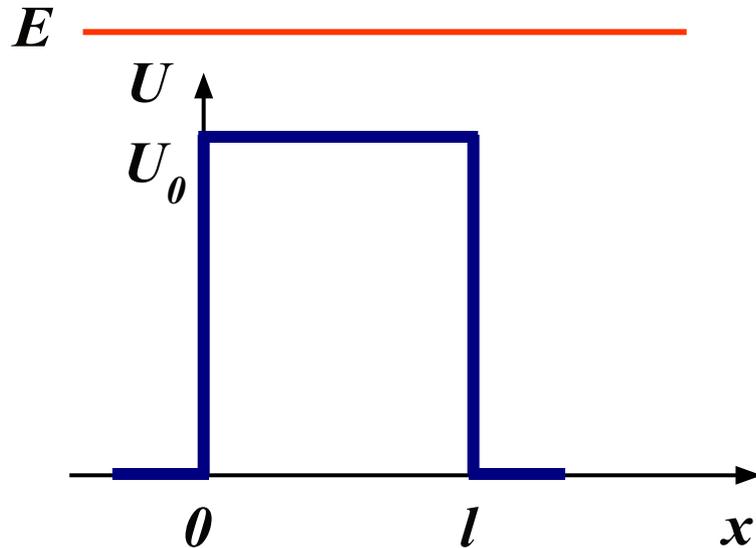
$0 \leq x \leq l$ . Скорость частицы уменьшается;  $x > l$  - скорость частицы постоянна.

2.  $E < U_0$ . Частица отражается от барьера и летит в обратную сторону. Сквозь барьер частица проникнуть не может.

# ПРОХОЖДЕНИЕ ЧАСТИЦЫ ЧЕРЕЗ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ БАРЬЕР

## Поведение частицы в квантовой механике.

1.  $E > U_0$ . Имеется ненулевая вероятность того, что частица отразится от барьера и полетит в обратную сторону.



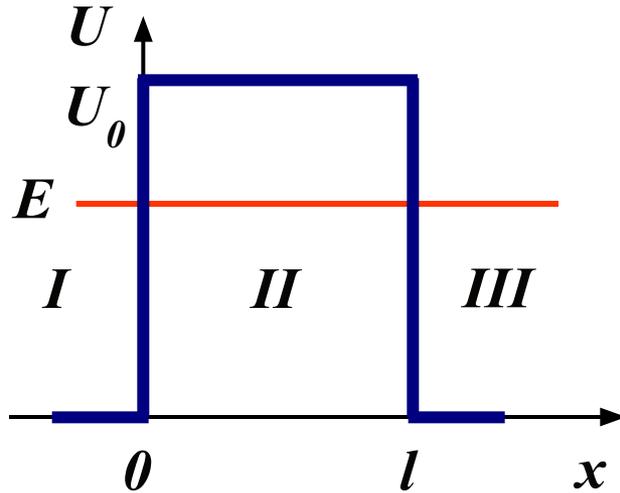
2.  $E < U_0$ . Частица может проникнуть через барьер и оказаться в области  $x > l$ .

Покажем это. Пусть  $E < U_0$ .

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi = 0 \quad \text{для областей I и III;}$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E) \psi = 0 \quad \text{- для области II.}$$

# ПРОХОЖДЕНИЕ ЧАСТИЦЫ ЧЕРЕЗ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ БАРЬЕР



Введем обозначения:

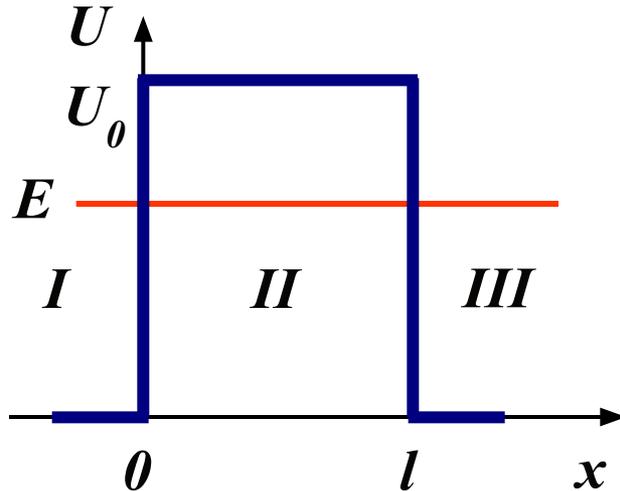
$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E, \quad \beta^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E)$$

С учетом этих обозначений:

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

$$\frac{\partial^2 \psi_2}{\partial x^2} - \beta^2 \psi_2 = 0$$

# ПРОХОЖДЕНИЕ ЧАСТИЦЫ ЧЕРЕЗ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ БАРЬЕР



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

$$\frac{\partial^2 \psi_2}{\partial x^2} - \beta^2 \psi_2 = 0$$

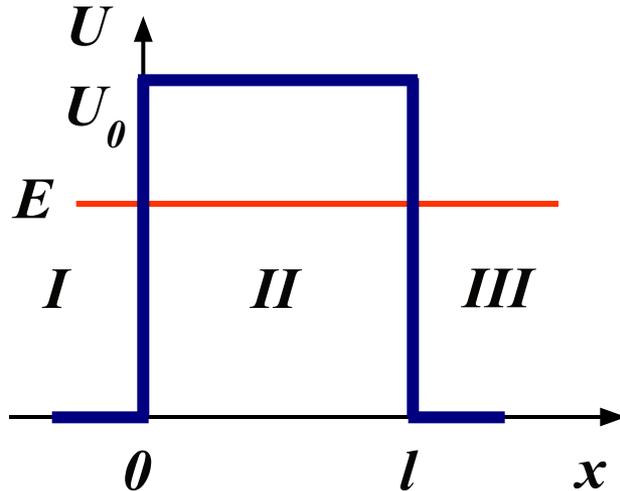
Как решить эти уравнения?

Записанные уравнения – это *линейные дифференциальные однородные уравнения второго порядка с постоянными коэффициентами.*

**Заглянуть в соответствующий раздел курса «Элементы математического анализа»!**

Такие уравнения решают методом подстановки.

# ПРОХОЖДЕНИЕ ЧАСТИЦЫ ЧЕРЕЗ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ БАРЬЕР



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

$$\frac{\partial^2 \psi_2}{\partial x^2} - \beta^2 \psi_2 = 0$$

Решение уравнений записывается в виде  $\psi = \exp(\lambda x)$ , где  $\lambda$  - постоянная величина.

Итог - решения уравнений для трех выделенных областей :

$$\psi_1 = A_1 \exp(ikx) + B_1 \exp(-ikx)$$

$$\psi_2 = B_2 \exp(-\beta x)$$

$$\psi_3 = A_3 \exp(ikx)$$

Нужно найти значения констант  $A_1, A_3, B_1, B_2$ .

# ПРОХОЖДЕНИЕ ЧАСТИЦЫ ЧЕРЕЗ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ БАРЬЕР

$$\psi_1 = A_1 \exp(ikx) + B_1 \exp(-ikx)$$

$$\psi_2 = B_2 \exp(-\beta x)$$

$$\psi_3 = A_3 \exp(ikx)$$

Константы определяются «сшиванием» уравнений на границах областей с помощью граничных условий: пси-функция должна удовлетворять условию *ограниченности*, *непрерывности*, не иметь изломов, т.е. должна быть *гладкой*.

Эта задача решена. Рассмотрим лишь некоторые выводы.

При условии  $E < U_0$  (полная энергия частицы меньше высоты потенциального барьера), законы классической физики однозначно не разрешают частице проникнуть сквозь барьер.

С позиций квантовой механики частица имеет *отличную от нуля вероятность* прохождения через потенциальный барьер конечной ширины.

# ПРОХОЖДЕНИЕ ЧАСТИЦЫ ЧЕРЕЗ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ БАРЬЕР

$$\psi_1 = A_1 \exp(ikx) + B_1 \exp(-ikx)$$

$$\psi_2 = B_2 \exp(-\beta x)$$

$$\psi_3 = A_3 \exp(ikx)$$

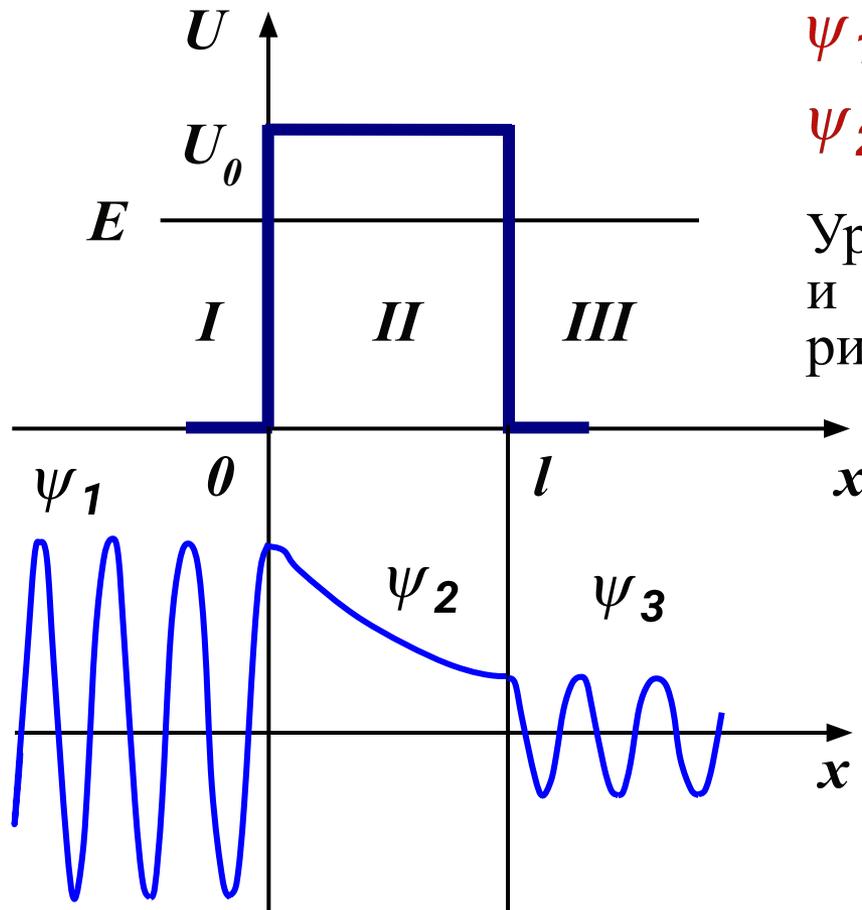
В областях *I* и *III* общие решения представляют собой суперпозицию волн, распространяющихся в положительном (решение вида  $\exp(ikx)$ ) и отрицательном (решение вида  $\exp(-ikx)$ ) направлениях оси  $x$ .

В области *III* - за барьером – есть только проходящая волна.

Вспомним, что волны, которые ассоциируются со свободно движущимися частицами, получили название *волн де Бройля*.

В области *II* функция не соответствует плоской волне.

# ПРОХОЖДЕНИЕ ЧАСТИЦЫ ЧЕРЕЗ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ БАРЬЕР



$$\psi_1 = A_1 \exp(ikx) + B_1 \exp(-ikx)$$

$$\psi_2 = B_2 \exp(-\beta x) \quad \psi_3 = A_3 \exp(ikx)$$

Уравнения для функций  $\psi_1$ ,  $\psi_2$  и  $\psi_3$  качественно иллюстрируется рисунком.

Из уравнений следует, что волновая функция не равна нулю и внутри барьера, а в области **III** (для узкого барьера) волновая функция будет опять иметь вид волн де Бройля с той же частотой, что и в области **I**, но с меньшей амплитудой.

Таким образом, квантовая механика приводит к принципиально новому специфическому квантовому явлению.

## ПРОХОЖДЕНИЕ ЧАСТИЦЫ ЧЕРЕЗ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ БАРЬЕР

При преодолении потенциального барьера частица как бы пробивает «туннель» в барьере. Это явление называется *туннельным эффектом*.

Вероятность прохождения частицы через барьер определяется отношением квадратов модулей амплитуд прошедшей и падающей волн:

$$D = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2}$$

и называется *коэффициентом прохождения* (или коэффициентом прозрачности).

По аналогии можно ввести и *коэффициент отражения* частицы от барьера:

$$R = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2}$$

Очевидно, что  $D + R = 1$

## ***КАЧЕСТВЕННАЯ МОДЕЛЬ АТОМА ВОДОРОДА В КВАНТОВОЙ ФИЗИКЕ.***

### Модель атома.

В центре атома неподвижный точечный заряд (ядро), создающий вокруг себя стационарное электростатическое поле.

В этом поле - отрицательный точечный заряд (электрон).

Поле ядра - потенциальная яма для электрона.

В связи с этим энергетический спектр электрона в поле является *дискретным* (квантованным).

Наиболее устойчивым для электрона является состояние с *минимумом* энергии (основное стационарное состояние).

Электрон находится в основном стационарном состоянии до тех пор, пока в поле ядра не появится какое-то сильное возмущение (например, столкновение).

## *КАЧЕСТВЕННАЯ МОДЕЛЬ АТОМА ВОДОРОДА*

В результате возмущения электрон перескакивает на возбужденный уровень.

Возбужденное состояние электрона неустойчиво.

Через некоторое время электрон вернется на основной уровень.

Его энергия уменьшается. Освобождающуюся энергию забирает рождающийся при переходе фотон.

Фотон уносит с собой порцию (квант) энергии, равную разности между возбужденным и основным уровнями энергии.

## *Одномерное уравнение Шредингера для водородоподобного атома. Квантование энергии*

Выберем систему координат, начало которой совмещено с центром атома. Это *сферическая* система.

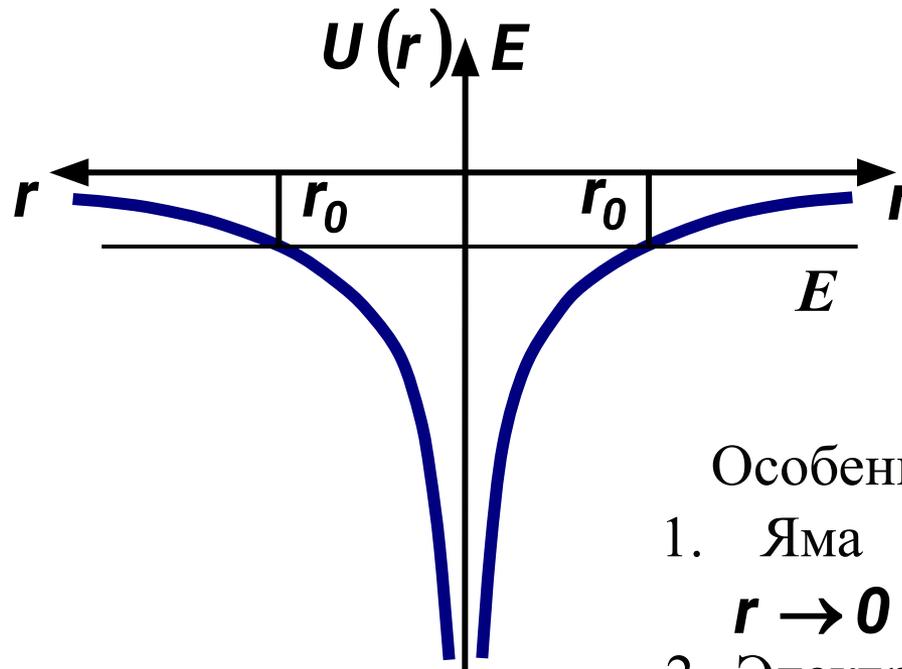
В такой координатной системе поле, в котором движется электрон, является центрально-симметричным.

Потенциальная энергия взаимодействия электрона с ядром задается законом Кулона:

$$U(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}, \quad Z \cdot e - \text{заряд ядра.}$$

Для атома водорода  $Z=1$ , для водородоподобных атомов  $Z > 1$ .

## Одномерное уравнение Шредингера для водородоподобного атома. Квантование энергии



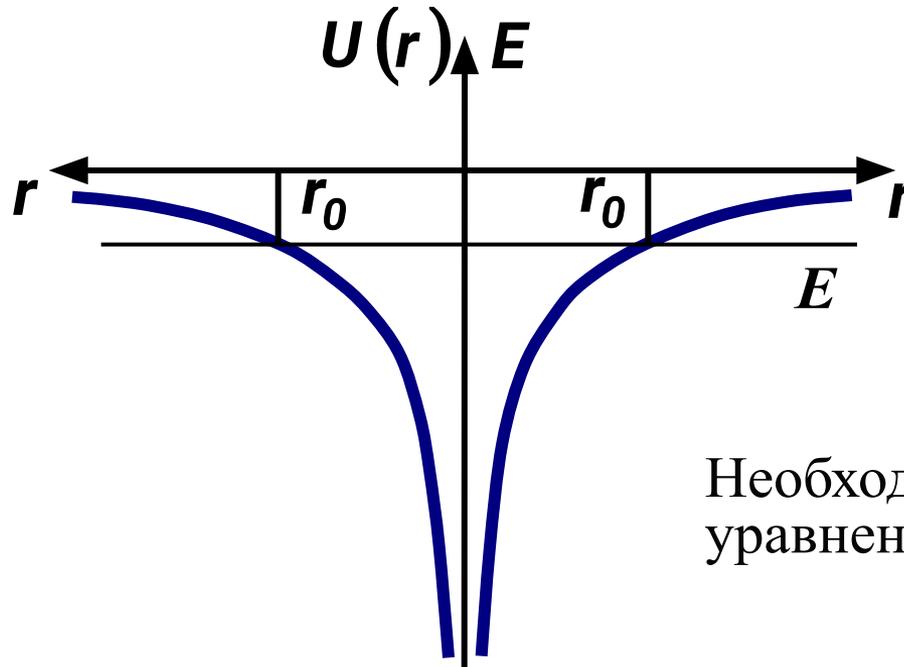
Потенциальная энергия взаимодействия зарядов – это *кулоновская энергия*, а потенциальная яма, в которой находится электрон – это *кулоновская потенциальная яма*. Гипербола.

Особенности ямы:

1. Яма *бесконечно глубокая*. При  $r \rightarrow 0$  функция  $U(r) \rightarrow -\infty$ .
2. Электрон может быть заперт в такой яме только при отрицательных значениях энергии  $E < 0$ .

Отойти на расстояние большее  $r_0$  от ядра электрон не может.

## Одномерное уравнение Шредингера для водородоподобного атома. Квантование энергии



Квантовая задача: найти энергетический спектр и стационарные волновые функции электрона в потенциальном поле атомного ядра.

Необходимо решить стационарное уравнение Шредингера.

Одномерное уравнение Шредингера в сферических координатах:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r\psi) + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \psi = 0$$

Решения этого уравнения зависят только от радиуса  $r$ .

## **Одномерное уравнение Шредингера для водородоподобного атома. Квантование энергии**

Из теории дифференциальных уравнений: решения, удовлетворяющие условиям **однозначности, конечности и непрерывности** волновой функции, получаются только при собственных значениях энергии вида

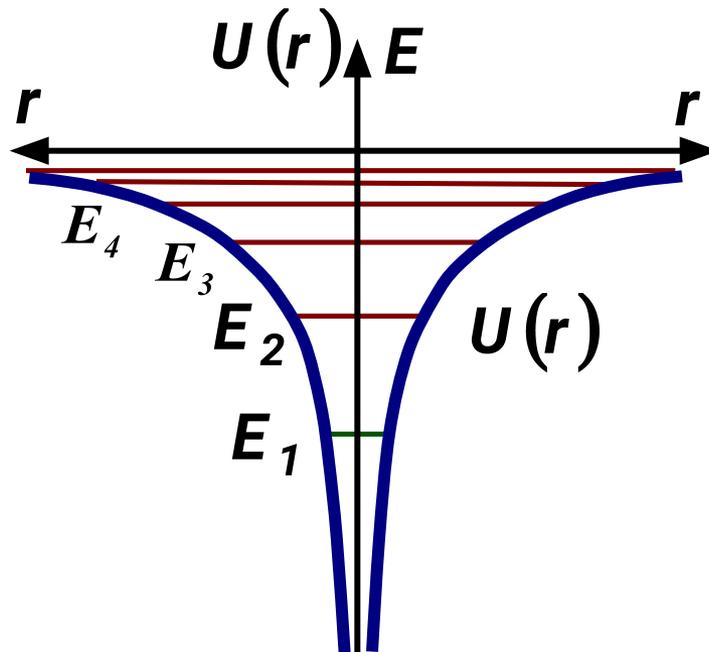
$$E_n = -\frac{me^4 Z^2}{8h^2 \epsilon_0^2} \frac{1}{n^2}, \quad (n = 1, 2, 3, \dots),$$

В теории Бора – то же решение (см. Лекция 10. Атом Бора).

Но: Бору пришлось вводить постулаты. В квантовой механике это получается естественно из решения уравнения Шредингера.

## Одномерное уравнение Шредингера для водородоподобного атома. Квантование энергии

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



С ростом  $n$  уровни сгущаются, значению  $n = \infty$  соответствует энергия  $E_\infty = 0$ , отделяющая дискретный спектр от непрерывного.

При  $E > 0$  электрон свободный. Атом ионизован.

Энергия ионизации  $E_i$  атома водорода:

$$E_i = -E_1 = -\frac{me^4}{8h^2 \epsilon_0^2} = 13.5 \text{ эВ.}$$

Нижний уровень  $E_1$  (минимально возможная энергия) - **основной**, остальные  $E_n > E_1$  - **возбужденные**.

## *Общее решение уравнения Шредингера для водородоподобного атома. Квантовые числа.*

Общее решение уравнения Шредингера, зависящее от всех трех сферических координат  $r, \varphi, \vartheta$ , находят методом разделения переменных.

При этом волновая функция  $\psi(r, \varphi, \vartheta)$  представляется в виде произведения двух сомножителей, один из которых зависит только от  $r$ , а другой – только от углов  $\varphi, \vartheta$ .

Но: теперь имеющие физический смысл решения уравнения Шредингера при  $E < 0$  содержат уже не одно квантовое число  $n$ , а четыре:  $n, l, m, m_s$ .

Определим смысл квантовых чисел.

## *Общее решение уравнения Шредингера для водородоподобного атома. Квантовые числа.*

Из квантовомеханических представлений: состояние электрона в атоме водорода полностью определяется значениями четырех физических величин:

- энергии  $E$ ,
- орбитального момента импульса  $L$ ,
- проекции  $L_z$  орбитального момента импульса на произвольно выбранное направление  $z$ ,
- проекции  $L_{sz}$  спинового момента импульса электрона на то же направление.

Энергия. Возможные значения энергии электрона  $E_n$  в атоме (энергетические уровни) определяются главным квантовым числом  $n = 1, 2, 3, \dots$

## *Общее решение уравнения Шредингера для водородоподобного атома. Квантовые числа.*

Орбитальный (механический) момент импульса  $L$ . Всякая частица, совершающая движение по траектории (в классической механике), обладает *моментом импульса*.

Это вектор  $\vec{L} = [\vec{r}, \vec{p}]$ , где  $\vec{r}$  - радиус-вектор частицы,  $\vec{p}$  - ее импульс.

В квантовой механике вводятся четыре параметра, связанных с моментом импульса: *квадрат момента* и три *проекции момента импульса* на координатные оси.

Правило: одновременно могут иметь определенные значения лишь квадрат момента и одна из проекций момента импульса.

Это означает, что вектор момента импульса не имеет определенного направления и не может изображаться, как в классической механике, отрезком прямой.

## ***Общее решение уравнения Шредингера для водородоподобного атома. Квантовые числа.***

Из решения уравнения Шредингера: механический орбитальный момент импульса электрона *квантуется*, т.е. принимает только определенные дискретные значения. Эти значения определяются формулой

$$L_l = \hbar \sqrt{l(l+1)}$$

где  $l$  – *орбитальное квантовое число*, которое при заданном  $n$  принимает значения  $l = 0, 1, \dots, (n - 1)$ .

Таким образом, квантовое число  $l$  определяет момент импульса электрона в атоме.

## *Общее решение уравнения Шредингера для водородоподобного атома. Квантовые числа.*

Проекция  $L_z$  орбитального момента импульса на координатную ось также величина дискретная и кратная  $\hbar$ :

$$L_z = m\hbar$$

$m$  – магнитное квантовое число.  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$ .

Видно, что магнитное квантовое число может принимать  $(2l+1)$  значений, следовательно, столько же значений может принимать проекция  $L_z$ .

Проекция  $L_{sz}$  спинового момента импульса электрона на направление  $\vec{z}$ . Спиновый момент или *спин* – это параметр частицы, не зависящий от ее состояния.

Иначе, это собственный механический момент импульса электрона, не связанный с его орбитальным движением.

## *Общее решение уравнения Шредингера для водородоподобного атома. Квантовые числа.*

Значения проекции спинового момента импульса электрона также квантованы и определяются спиновым квантовым числом  $m_s$  (спиновое квантовое число часто тоже называют *спином*):

$$L_{zs} = m_s \hbar, \quad m_s = \pm \frac{1}{2}$$

Значения квантовых чисел  $n$ ,  $l$ ,  $m$ ,  $m_s$  полностью определяют квантовомеханическое состояние электрона в атоме водорода.

Квантовые числа  $n$ ,  $l$ ,  $m$  появляются при решении нерелятивистского уравнения Шредингера, а спиновое квантовое число  $m_s$  появляется лишь при решении уравнения Дирака, (релятивистское уравнение Шредингера).