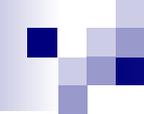




**Теория атома
водорода по Бору.
Элементы квантовой
механики**

Лекция № 28
ФИЗИКА



Учебный вопрос №1:

Теория атома
водорода
по Бору

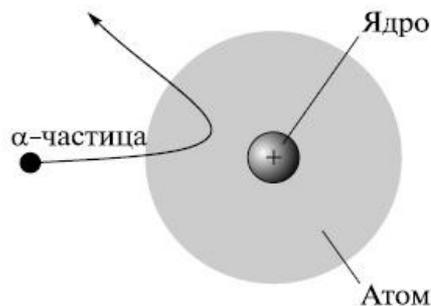
.

Атом — наименьшая часть химического элемента, являющаяся носителем его свойств.

Э. Резерфорд (1911) провел опыты по рассеянию α -частиц (ядер атомов гелия) на тонкой (1 мкм) золотой фольге. Масса α -частиц примерно в 7300 раз больше массы электрона, ее заряд положительный и равен $2e$.

Резерфорд, основываясь на результатах проведенных опытов, предложил **ядерную (планетарную) модель атома**. Согласно этой модели, вокруг положительного ядра, имеющего заряд Ze

(Z — порядковый номер элемента в Периодической системе элементов Менделеева; e — элементарный заряд), размер 10^{-15} — 10^{-14} м и массу, практически равную массе атома, в области с линейными размерами порядка 10^{-10} м по замкнутым орбитам движутся электроны, образуя электронную оболочку атома. Так как атомы нейтральны, заряд ядра равен суммарному заряду электронов, т. е. вокруг ядра должно вращаться Z электронов.



Ядерная модель атома противоречит законам классической механики и электродинамики. Так, скорость электрона, движущегося по круговой орбите радиусом $r = 10^{-10}$ м, должна быть порядка $v = 10^6$ м/с (можно рассчитать по формуле:

$$\frac{m_e v^2}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2},$$

$$a = \frac{v^2}{r} \approx 10^{22} \text{ м/с}$$



Учебный вопрос №2:

**Линейчатые спектры
атомов.**

В дальнейшем в спектре атома водорода обнаружено еще несколько серий. В *ультрафиолетовой области спектра* находится

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

в инфракрасной области спектра

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

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

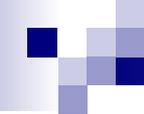
- *серия Пфунда* $\nu = R \left(\frac{1}{5^2} - \frac{1}{n^2} \right)$ ($n = 6, 7, 8, \dots$);

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

Все приведенные серии в спектре атома водорода могут быть описаны одной формулой, называемой *обобщенной формулой Бальмера*:

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

где m имеет в каждой серии постоянное значение, $m = 1, 2, 3, 4, 5, 6$ (*определяет серию*); n принимает целочисленные значения, начиная с $m + 1$ (*определяет отдельные линии этой серии*).



Учебный вопрос №3:

Постулаты Бора

Первый постулат Бора (постулат стационарных состояний): в атоме существуют стационарные (не изменяющиеся со временем) состояния, в которых он не излучает энергию; эти состояния характеризуются определенными дискретными значениями энергии.

Стационарным состояниям атома соответствуют стационарные орбиты, по которым движутся электроны. При этом не происходит излучения электромагнитных волн.

Согласно Бору, в стационарном состоянии атома электрон, двигаясь по круговой орбите, должен иметь *дискретные квантованные значения* момента импульса, удовлетворяющие условию

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

где m_e — масса электрона; v — его скорость на n -й орбите радиусом r_n ,

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,05 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}$$

— *постоянная Планка*. Выражение (1) называют *правилом квантования орбит* по Бору.

Второй постулат Бора (правило частот): при переходе электрона с одной стационарной орбиты на другую излучается (поглощается) один фотон с энергией

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

равной разности энергий соответствующих стационарных состояний [E_n и E_m — соответственно энергии стационарных состояний атома до и после излучения (поглощения)].

При $E_m < E_n$ происходит излучение фотона (переход атома из состояния с большей энергией в состояние с меньшей энергией, т. е. переход электрона с более удаленной от ядра орбиты на близлежащую); при $E_m > E_n$ — поглощение фотона (переход атома в состояние с большей энергией, т. е. на более удаленную от ядра орбиту). Набор возможных дискретных частот $\nu = \frac{E_n - E_m}{h}$ квантовых переходов и определяет линейчатый спектр атома.



Учебный вопрос №4:

Энергия атомов
водорода по Бору.

На электрон в атоме водорода со стороны ядра действует кулоновская сила, сообщая ему центростремительное ускорение.

Уравнение движения электрона можно записать в виде

$$\frac{m_e v_n^2}{r_n} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_n^2}, \quad (2)$$

где ϵ_0 — электрическая постоянная.

Из выражений (1) и (2), исключив v_n , найдем выражение для радиусов допустимых орбит:

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

Радиус первой орбиты электрона при $n = 1$, называемый *первым боровским радиусом* (a), равен

$$r_1 = a = \frac{\hbar^2 \cdot 4\pi\epsilon_0}{m_e e^2} = 0,528 \cdot 10^{-10} \text{ м} = 52,8 \text{ пм} \quad (3)$$

и зависит лишь от фундаментальных постоянных. Из соотношения (3) следует, что

$$r_n = n^2 r_1,$$

т.е. радиусы орбит для стационарных состояний квантованы и равны соответственно $r_1, 4r_1, 9r_1, \dots$. Каждый из этих радиусов пропорционален квадрату целого числа n , называемому *квантовым числом*.

Полная энергия электрона в атоме водорода складывается из его кинетической энергии $\left[\frac{m_e v^2}{2} = \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right]$ и потенциальной энергии в электростатическом поле ядра $\left(-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right)$:

$$E_n = -\frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_n}.$$

Учитывая квантованные для радиусов стационарных орбит значения (2), получаем

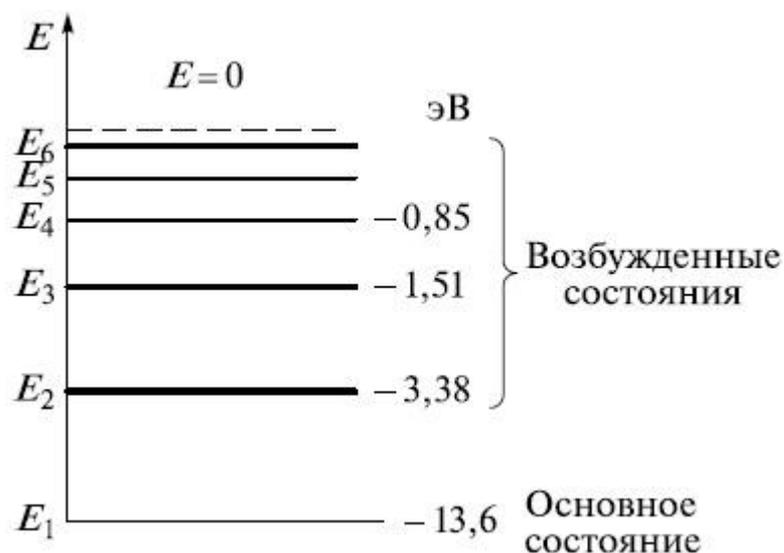
$$E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{m_e e^4}{8h^2 \epsilon_0^2} \quad (n = 1, 2, 3, \dots), \quad (4)$$

где знак «-» означает, что электрон находится в связанном состоянии. Из выражения (4) следует, что энергия электрона в атоме водорода может *принимать только дискретные значения*, т.е. *энергия атома квантуется*.

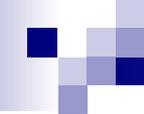
Подставив в (4) фундаментальные постоянные и выразив энергию в электронвольтах, получим, что

$$E_n = \frac{13,6}{n^2} (\text{эВ}), \quad (5)$$

т. е. энергетические состояния атома водорода образуют последовательность энергетических уровней, изменяющихся в зависимости от n . Состояние с минимальной энергией, или **основное состояние**, соответствует $n = 1$, а его энергия $E_1 = -13,6$ эВ. Состояния с $n > 1$ являются **возбужденными**.



Придавая n различные целочисленные значения, получаем для атома водорода, согласно формуле (5), возможные уровни энергии стационарных состояний электрона, схематически представленные на рис. в виде горизонтальных прямых. С увеличением квантового числа n энергетические уровни все больше сближаются и при $n \rightarrow \infty$ $E \rightarrow 0$. Таким образом, электрон в атоме водорода обладает минимальной энергией ($E_1 = -13,6$ эВ) при $n = 1$ и максимальной ($E_\infty = 0$) при $n = \infty$. Отметим, что выше уровня $E = 0$ электрон может иметь любую энергию, так как в данном случае он является свободным.



Учебный вопрос №5:

Спектр атома
водорода по Бору.

Согласно второму постулату Бора при переходе электрона в атоме водорода из стационарного состояния n в стационарное состояние m с меньшей энергией испускается квант

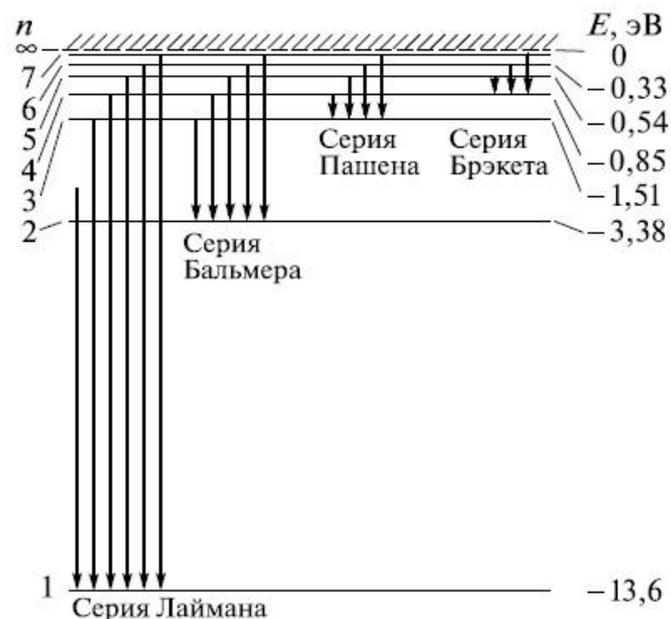
$$h\nu = E_n - E_m = -\frac{m_e e^4}{8h^2 \varepsilon_0^2} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right),$$

откуда частота излучения

$$\nu = \frac{m_e e^4}{8h^3 \varepsilon_0^2} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) = R \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right),$$

где $R = \frac{m_e e^4}{8h^3 \varepsilon_0^2}$

— величина, совпадающая с постоянной Ридберга в эмпирических формулах для атома водорода



На рис. стрелками показаны переходы, приводящие к образованию различных серий излучения атома водорода. Серия Лаймана испускается в результате переходов электрона со второго, третьего и т.д. энергетических уровней ($n = 2, 3, 4, \dots$) на основной ($m = 1$). Переход электронов с возбужденных уровней ($n = 3, 4, 5, \dots$) на уровень $m = 2$ приводит к серии Бальмера, переход с возбужденных уровней ($n = 4, 5, 6, \dots$) на уровень $m = 3$ — к серии Пашена и т.д.

Спектр поглощения атома водорода также является линейчатным, однако при нормальных условиях он содержит только одну серию — серию Лаймана. Это объясняется тем, что при относительно небольших температуре и давлении атомы водорода не возбуждены и поглощение будет происходить только с первого энергетического уровня, при этом наблюдаются лишь переходы из основного состояния в возбужденные, т.е. возникает серия Лаймана.

Учебный вопрос №6:

Рентгеновские спектры.

Рентгеновские спектры — спектры испускания и поглощения рентгеновского излучения (электромагнитного излучения с длиной волны в пределах от 10^{-12} до 10^{-9} м). Самым распространенным источником рентгеновского излучения является рентгеновская трубка. Спектр излучения рентгеновской трубки представляет собой наложение тормозного и характеристического рентгеновских спектров.

Сплошной (тормозной) рентгеновский спектр

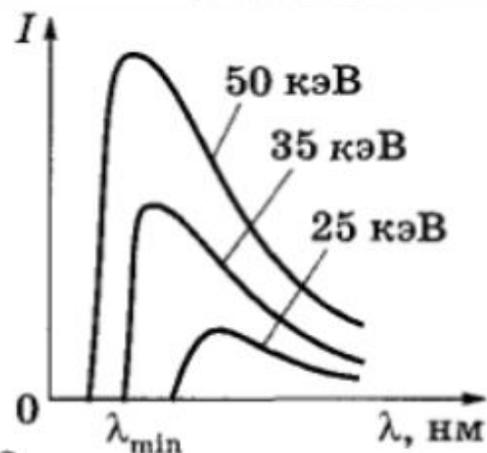
Природа сплошного рентгеновского спектра

Возникает при *торможении* бомбардирующих анод рентгеновской трубки быстрых электронов. Определяется только энергией бомбардирующих анод электронов и не зависит от материала анода.

Особенности сплошного спектра

1. Существование максимума интенсивности, смещающегося с повышением напряжения в сторону коротких длин волн.

2. Существование минимальной длины волны λ_{\min} — коротковолновой границы сплошного спектра (зависит лишь от кинетической энергии электронов, вызывающих тормозное излучение, и не зависит от вещества анода).



Коротковолновая граница сплошного спектра

$$\lambda_{\min} = \frac{c}{\nu_{\max}} = \frac{ch}{eU}$$

Согласно квантовым представлениям, энергия рентгеновских фотонов $h\nu$, возникающих при торможении электронов, не может быть больше кинетической энергии eU этих электронов: $h\nu \leq eU$.

[$\nu_{\max} = eU/h$; λ_{\min} — коротковолновая граница сплошного спектра (чем больше энергия, тем меньше λ_{\min}); eU — энергия бомбардирующих анод электронов; c — скорость света в вакууме; h — постоянная Планка; ν_{\max} — максимальная частота излучения рентгеновских фотонов]

Характеристический рентгеновский спектр

Природа характеристического рентгеновского спектра

Возникает, когда энергия бомбардирующих анод электронов достаточно для выбивания электронов с *внутренних оболочек* атомов вещества. На фоне сплошного спектра появляются отдельные резкие линии — линейчатый спектр, определяемый материалом анода.

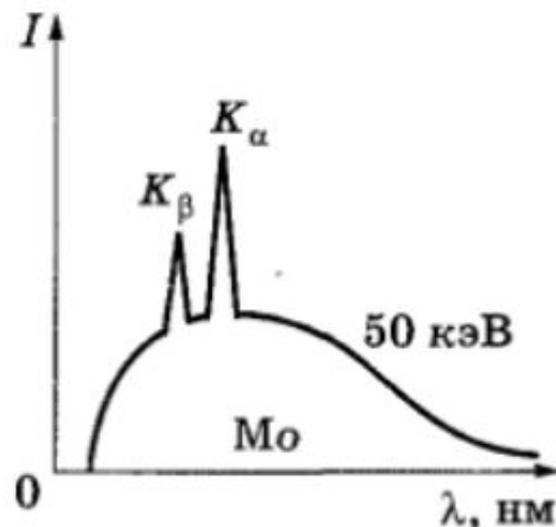
Особенности характеристического спектра

◆ Они просты и однотипны — состоят из нескольких серий, обозначаемых K , L , M , N и O .

◆ Каждая серия содержит небольшой набор отдельных линий, обозначаемых в порядке убывания длины волны индексами α , β , γ , ... (K_α , K_β , K_γ , ..., L_α , L_β , L_γ , ...).

◆ При переходе от легких элементов к тяжелым весь спектр, без изменения его структуры, монотонно смещается в сторону коротких волн.

◆ Атомы каждого химического элемента (даже в химических соединениях) обладают определенным, присущим только данному элементу, характеристическим спектром.



Возбуждение характеристических рентгеновских серий

Возбуждение характеристических рентгеновских серий обусловлено процессами, происходящими во внутренних, застроенных оболочках атомов (они имеют сходное строение). Если, например, вырывается один из внутренних K -электронов металла (под действием внешнего электрона или высокоэнергетического фотона), то на его место может перейти электрон с более удаленных от ядра оболочек L , M , N , Такие переходы сопровождаются испусканием рентгеновских квантов и возникновением спектральных линий K -серии: K_α ($L \rightarrow K$), K_β ($M \rightarrow K$), K_γ ($N \rightarrow K$) и т. д.

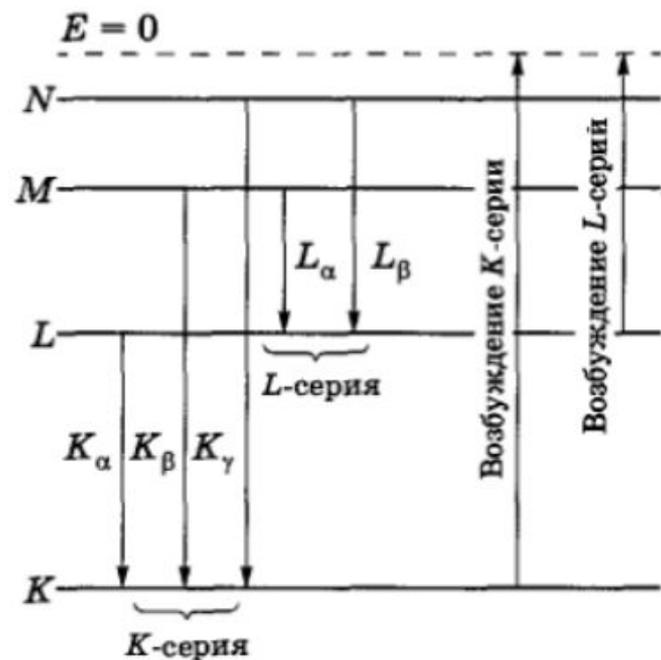
Длины волн в ряду $K_\alpha \rightarrow K_\beta \rightarrow K_\gamma$

Самая длинноволновая линия — K_α , так как частоты линий возрастают в ряду $K_\alpha \rightarrow K_\beta \rightarrow K_\gamma$ (энергия, высвобождаемая при переходе электрона на K -оболочку с более удаленных оболочек, увеличивается).

Интенсивности линий в ряду $K_\alpha \rightarrow K_\beta \rightarrow K_\gamma$

Интенсивности линий в ряду $K_\alpha \rightarrow K_\beta \rightarrow K_\gamma$ убывают, поскольку вероятность переходов электронов с L -оболочки на K -оболочку больше, чем с более удаленных оболочек M и N .

K -серия сопровождается L , M , ... сериями, так как при испускании ее линий появляются вакансии в оболочках L , M , Возникновение L , M , ... серий объясняется аналогично (они наблюдаются только для тяжелых элементов).



Частоты линий характеристического излучения

Закон Мозли

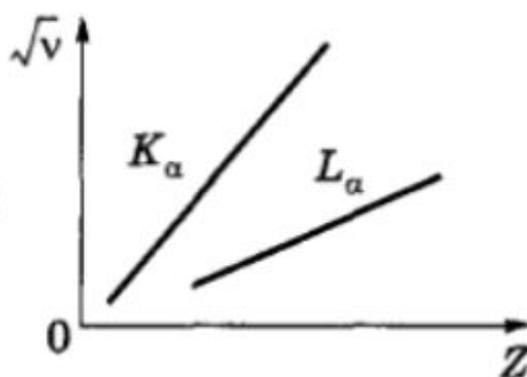
$$\nu = R (Z - \sigma)^2 \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

Подобен в записи обобщенной формуле Бальмера

Закон Мозли в другой записи

$$\sqrt{\nu} = a (Z - \sigma)$$

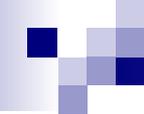
Из записи следует, что $\sqrt{\nu}$ — линейная функция атомного номера Z . На рисунке представлены кривые, на которых укладываются частоты линий K_α и L_α различных элементов, т. е. закон Мозли точно выполняется.



[R — постоянная Ридберга; Z — порядковый номер в Периодической системе элементов; σ — постоянная экранирования, одинаковая в пределах каждой серии для всех элементов (для K -серии $\sigma = 1$, для L -серии $\sigma = 7,5$ и т. д.), $m = 1, 2, 3, \dots$ (определяет рентгеновскую серию), $n = m + 1, m + 2, \dots$ (определяет линию соответствующей серии); a — постоянная, имеющая определенное значение для каждой линии]

Смысл постоянной экранирования

На электрон, совершающий переход, действует не весь заряд ядра Ze , а заряд $(Z - \sigma)e$, ослабленный экранирующим действием других электронов.



Учебный вопрос №7:

Корпускулярно-
волновой дуализм
свойств частиц
вещества

Согласно де Бройлю, с каждым *микрообъектом* связываются, с одной стороны, *корпускулярные характеристики* — энергия E и импульс p , а с другой — частота ν и длина волны λ . Количественные соотношения, связывающие корпускулярные и волновые свойства частиц, такие же, как для фотонов:

$$E = h\nu; p = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda},$$

где $h = 6,63 \cdot 10^{-34}$ Дж·с — постоянная Планка.

Длину волны, связываемую с частицей,

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

называют *длиной волны де Бройля*.

Это соотношение справедливо для любой частицы с импульсом p .

В формуле $p = \frac{mv}{\sqrt{1-v^2/c^2}}$ (для релятивистских частиц) и $p = mv$

(в нерелятивистском приближении $v \ll c$), где v — скорость частицы с массой m ; c — скорость света в вакууме.

Согласно *соотношению неопределенностей Гейзенберга*, микро-частица (микрообъект) не может иметь *одновременно* точных значений координаты (x, y, z) и компонентов импульса (p_x, p_y, p_z) , причем неопределенности этих величин удовлетворяют условию

$$\begin{aligned}\Delta x \Delta p_x &\geq \hbar, \\ \Delta y \Delta p_y &\geq \hbar, \\ \Delta z \Delta p_z &\geq \hbar,\end{aligned}\tag{П.1.1}$$

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

В квантовой теории рассматривается также соотношение неопределенностей для энергии и времени:

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar,\tag{П.1.2}$$

где ΔE — неопределенность энергии некоторого состояния системы; Δt — промежуток времени, в течение которого оно существует.

Функция, описывающая распределение вероятности нахождения частицы в данный момент времени в некоторой точке пространства — $\Psi(x, y, z, t)$ (она называется **волновой функцией**, или пси-функцией), определяется так, чтобы вероятность dW того, что частица находится в элементе объема dV , равнялась произведению $|\Psi|^2$ и элемента объема dV :

$$dW = |\Psi|^2 dV. \quad (\text{П.2.1})$$

Физический смысл имеет не сама функция Ψ , а квадрат ее модуля

$$|\Psi|^2 = \Psi^* \Psi,$$

где Ψ^* — функция, комплексно-сопряженная Ψ .

Величина

$$|\Psi|^2 = \frac{dW}{dV}$$

имеет смысл **плотности вероятности**, т.е. определяет вероятность нахождения частицы в окрестности точки с координатами

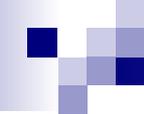
x, y, z . Таким образом, величиной $|\Psi|^2$ определяется *интенсивность волн де Бройля*.

Поскольку $|\Psi|^2 dV$ определяется как вероятность, то необходимо волновую функцию Ψ нормировать так, чтобы *вероятность достоверного события обращалась в единицу*, если за объем V принять бесконечный объем всего пространства. Это означает, что при данном условии частица должна находиться где-то в пространстве. Следовательно, ***условие нормировки вероятностей***

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi|^2 dV = 1, \quad (\text{П.2.2})$$

где данный интеграл вычисляется по всему бесконечному пространству, т.е. по координатам x, y, z от $-\infty$ до $+\infty$.

Волновая функция — объективная характеристика состояния микрочастиц и должна удовлетворять ряду ограничений. Она должна быть *конечной* (вероятность не может быть больше единицы), *однозначной* (вероятность не может быть неоднозначной величиной) и *непрерывной* (вероятность не может изменяться скачком).



Учебный вопрос №8:

Временное уравнение Шредингера

.

Это уравнение должно быть уравнением относительно волновой функции $\Psi(x, y, z, t)$, так как именно она или, точнее, величина $|\Psi|^2$ определяет вероятность пребывания частицы в момент времени t в объеме dV , т.е. в области с координатами $x, x + dx; y, y + dy; z, z + dz$.

Э. Шредингер (1926) постулировал основное уравнение нерелятивистской квантовой механики. Справедливость этого уравнения (как и всяких постулатов!) подтверждается согласием с опытом получаемых с его помощью результатов. Уравнение Шредингера записывается в виде

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + U(x, y, z, t)\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}, \quad (\text{П.3.1})$$

где $\hbar = \frac{h}{2\pi}$; m — масса частицы; Δ — оператор Лапласа ($\Delta\Psi = \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}$); i — мнимая единица; $U(x, y, z, t)$ — потен-

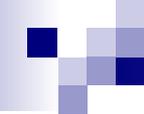
циальная функция частицы в силовом поле, в котором она движется; $\Psi(x, y, z, t)$ — искомая волновая функция частицы.

Уравнение (П.3.1) называют *общим уравнением Шредингера* или *временным уравнением Шредингера*. В квантовой механике оно играет такую же роль, как уравнение Ньютона в классической. Уравнение Шредингера справедливо для любой микрочастицы, движущейся с малой (по сравнению со скоростью света) скоростью, т.е. со скоростью $v \ll c$. Оно 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 простейшем случае сводится к условию нормировки вероятностей (П.2.2).



Учебный вопрос №9:

Уравнение
Шредингера
для стационарных
состояний

В общем уравнении Шредингера (П.3.1) функция $U(x, y, z, t)$ — потенциальная функция частицы в силовом поле, в котором она движется. Если силовое поле *стационарно*, то функция U не зависит от времени [$U = U(x, y, z)$] и имеет смысл потенциальной энергии. В данном случае решение уравнения Шредингера (П.3.1) можно искать в виде произведения двух функций, одна из которых есть функция только координат, другая — только времени:

$$\Psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z)\varphi(t). \quad (\text{П.4.1})$$

Подставив функцию (П.4.1) в уравнение Шредингера (П.3.1) и разделив левую и правую части на произведение $\psi(x, y, z)\varphi(t)$, получим

$$\frac{1}{\psi(x, y, z)} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(x, y, z) + U(x, y, z) \psi(x, y, z) \right] = i\hbar \frac{1}{\varphi(t)} \frac{d\varphi(t)}{dt}. \quad (\text{П.4.2})$$

Так как левая часть уравнения зависит только от координат, а правая — только от времени, то их можно приравнять одной и той же постоянной разделения, в качестве которой, как можно показать, можно выбрать E — полную энергию частицы. Таким образом,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(x, y, z) + U(x, y, z) \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z), \quad (\text{П.4.3})$$

$$i\hbar \frac{d\varphi}{dt} = E \varphi(t). \quad (\text{П.4.4})$$

Уравнение (П.4.3) называют *стационарным уравнением Шредингера*. Его обычно записывают в более удобном виде:

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\psi = 0. \quad (\text{П.4.5})$$

Явный вид стационарного уравнения Шредингера определяется конкретной зависимостью $U(x, y, z)$.

Решая уравнение (П.4.4), получаем, что

$$\varphi(t) = Ce^{-\frac{i}{\hbar}Et}, \quad (\text{П.4.6})$$

где C — произвольная постоянная. Подставляя (П.4.6) в (П.4.1), видим, что в случае стационарного силового поля состояние частицы описывается волновой функцией

$$\Psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z)e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \quad (\text{П.4.7})$$

[постоянная C включена в функцию $\psi(x, y, z)$, откуда следует, что стационарность состояния не исключает зависимости волновой функции от времени, а только ограничивает ее гармоническим законом $e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$].

В стационарном состоянии плотность вероятности

$$w = |\Psi(x, y, z, t)|^2 = |\psi(x, y, z)|^2 \quad (\text{П.4.8})$$

выражается только через $\psi(x, y, z)$ и не зависит от времени. Обще-принято $\psi(x, y, z)$ также называть **волновой функцией**, хотя она является только *координатной (амплитудной) частью волновой функции* $\Psi(x, y, z, t)$ стационарного состояния.

В уравнение Шредингера (П.4.5) в качестве параметра входит полная энергия E . Решения этого уравнения (при условии, что ψ должны быть конечными, однозначными и непрерывными вместе со своими первыми производными) имеют место при определенном наборе E . Эти **значения энергии** называются **собственными**. Они могут образовывать как *непрерывный*, так и *дискретный спектр* энергий.



Учебный вопрос №10:

**Движение свободной
частицы.**

Свободной частице — частице, движущейся в отсутствие внешних полей, — согласно идее де Бройля, сопоставляется плоская волна де Бройля.

Известно, что уравнение плоской волны, распространяющейся вдоль оси x , имеет вид $\xi(x, t) = A \cos(\omega t - kx)$ или в комплексной записи $\xi(x, t) = A e^{i(\omega t - kx)}$. Следовательно, плоская волна де Бройля имеет вид

$$\Psi(x, t) = A e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)}. \quad (\text{П.5.1})$$

При записи плоской волны де Бройля учтено, что $\omega = \frac{E}{\hbar}$, $k = \frac{p}{\hbar}$ (ω — циклическая частота; k — волновое число; E — энергия частицы, p — ее импульс). Показатель экспоненты в плоской волне де Бройля берется со знаком «минус», но это несущественно, так как физический смысл имеет $|\Psi|^2 = \Psi^*\Psi$.

В случае свободной частицы внешние силы отсутствуют, поэтому $U(x) = \text{const}$ (рассматриваем одномерный случай, и ось x совпадает с направлением движения) и ее можно принять равной нулю. Тогда полная энергия частицы совпадает с ее кинетической энергией.

При рассмотренных выше условиях стационарное уравнение Шредингера (П.4.5) запишется в виде (учли, что для одномерной задачи $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2}$)

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi = 0 \quad (\text{П.5.2})$$

или

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + k^2 \psi = 0, \quad (\text{П.5.3})$$

где

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{p_x^2}{\hbar^2}. \quad (\text{П.5.4})$$

Прямой подстановкой можно убедиться в том, что частным решением уравнения (П.5.3) является функция $\psi(x) = Ae^{ikx}$ ($A = \text{const}$, $k = \text{const}$) с собственным значением энергии

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{p_x^2}{2m}. \quad (\text{П.5.5})$$

Функция $\psi(x) = Ae^{ikx} = Ae^{\frac{i}{\hbar}\sqrt{2mEx}}$ представляет собой координатную часть волновой функции $\Psi(x, t)$, поэтому зависящая от времени волновая функция (см. (П.4.7))

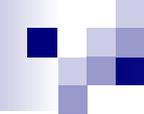
$$\psi(x, t) = \psi(x)e^{-\frac{i}{\hbar}Et} = Ae^{-\frac{i}{\hbar}(Et - p_x x)}. \quad (\text{П.5.6})$$

Таким образом, свободная частица в квантовой механике описывается плоской волной де Бройля [сравни (П.5.1) и (П.5.6)]. 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.

Зависимость энергии от импульса [см. (П.5.5)] оказывается обычной для нерелятивистских частиц. Следовательно, 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*.



Учебный вопрос №11:

Частица в
потенциальном ящике.
Квантование энергии.

Рассмотрение частицы в потенциальном ящике — одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками — имеет большое значение, так как потенциальная яма есть первое приближение силового поля, связывающего электроны в атоме, а также атомы в кристаллической решетке.

Предположим, что частица может двигаться только вдоль оси x и ее движение ограничено непроницаемыми стенками: $x = 0$ и $x = l$. Потенциальная энергия (рис. П.1) равна нулю при $0 \leq x \leq l$ и обращается в бесконечность при $x < 0$ и $x > l$.

Применим к частице, движущейся в потенциальной яме, стационарное уравнение Шредингера (П.4.5), учитывая, что для одномерной

задачи $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2}$:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \psi = 0. \quad (\text{П.6.1})$$

Частица за пределы ямы не проникает, т.е. в области $x < 0$ и $x > l$ функция $\psi(x) \equiv 0$, а из условия непрерывности следует, что ψ должна быть равна нулю и на границах ямы, т.е.

$$\psi(0) = \psi(l) = 0. \quad (\text{П.6.2})$$

В пределах ямы ($0 \leq x \leq l$) уравнение Шредингера

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi = 0 \quad \text{или} \quad \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + k^2 \psi = 0, \quad (\text{П.6.3})$$

где

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}. \quad (\text{П.6.4})$$

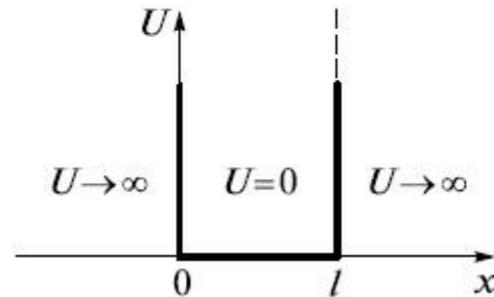


Рис. П.1

Общее решение дифференциального уравнения (П.6.3)

$$\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx.$$

Так как по (П.6.2) $\psi(0) = 0$, то $B = 0$. Тогда

$$\psi(x) = A \sin kx. \quad (\text{П.6.5})$$

Условие [см. (П.6.2)] $\psi(l) = A \sin kl = 0$ выполняется только при $kl = n\pi$, где n — целые числа, т.е. необходимо, чтобы

$$k = \frac{n\pi}{l} \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (\text{П.6.6})$$

($n = 0$ отпадает, так как тогда $\psi(x) \equiv 0$ — частица нигде не находится).

Из выражений (П.6.4) и (П.6.5) получим собственные значения энергии (см. п. 4):

$$E_n = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} \quad (n = 1, 2, 3, \dots), \quad (\text{П.6.7})$$

т.е. *спектр энергии частицы является дискретным (или квантованным)*. Квантованные значения E_n называют *уровнями энергии*, а число n , их определяющее, — *главным квантовым числом*.

Из формулы (П.6.7) следует, что существует минимальная, *не равная нулю* энергия:

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2}, \quad (\text{П.6.8})$$

соответствующая основному состоянию частицы. Наличие отличной от нуля минимальной энергии *противоречит классической механике* и *не противоречит соотношению неопределенностей*. В самом деле, частица «зажата» в области, на границах которой $U \rightarrow \infty$, поэтому ее положение известно с неопределенностью $\Delta x \approx l$. Тогда согласно (П.1.1), неопределенность импульса $\Delta p_x \geq \hbar/l$. Таким образом, квантово-механическое рассмотрение данной задачи приводит к выводу, что частица в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками не может иметь энергию меньше минимальной, равной $\frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2}$ [см. (П.6.8)].

Расстояния между соседними энергетическими уровнями, согласно (П.6.7):

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} (2n+1) \approx \frac{\pi^2 \hbar^2}{ml^2} n.$$

Например, для электрона при размерах ямы $l = 10^{-1}$ м (свободные электроны в металле) $E_n \approx 10^{-35}n$ Дж $\approx 10^{-16}n$ эВ, т.е. энергетические уровни расположены столь тесно, что спектр практически можно считать непрерывным. Если же размеры ямы соизмеримы с атомными ($l \approx 10^{-10}$ м), то для электрона $\Delta E_n \approx 10^{-17}n$ Дж $\approx 10^2 n$ эВ, т.е. получаются явно дискретные значения энергии (линейчатый спектр).

Таким образом, применение уравнения Шредингера к частице в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками приводит к *квантованным значениям энергии*, в то время как классическая механика на энергию этой частицы никаких ограничений не накладывает.

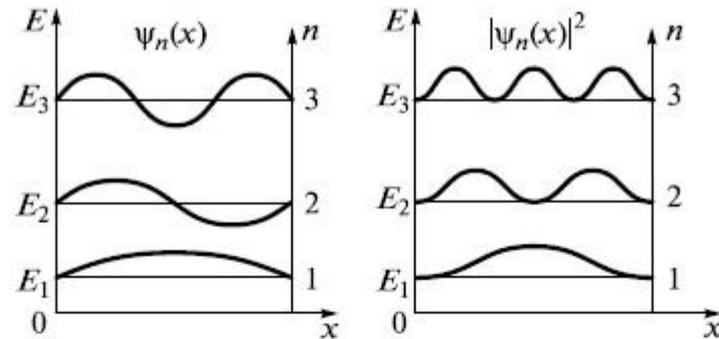


Рис. П.2

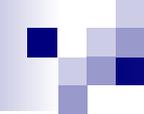
Подставив в (П.6.5) значение k [см. (П.6.6)], найдем собственные функции:

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

где постоянная интегрирования $A = \sqrt{\frac{2}{l}}$ (находится из условия нормировки (П.2.2)) $A^2 \int_0^l \sin^2 \frac{n\pi}{l} x dx = 1$. Тогда нормированные собственные функции

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{n\pi}{l} x \quad (n = 1, 2, 3, \dots). \quad (\text{П.6.9})$$

На рис. П.2 изображена схема энергетических уровней: энергии возбужденных состояний $4E_1, 9E_1, \dots$, соответственно значениям квантового числа $n = 2, 3, \dots$ [см. (П.6.7)]. На рисунке представлены также для $n = 1, 2, 3$ собственные функции (П.6.9) и плотности вероятности обнаружения частицы на различных расстояниях от стенок ямы, равные $|\psi_n(x)|^2 = \psi_n^*(x)\psi_n(x)$. Из рисунка следует, что, например, в состоянии с $n = 2$ частица не может находиться в середине ямы, в то время как одинаково часто может пребывать в ее левой и правой частях. Такое поведение частицы указывает на то, что представления о траекториях частицы в квантовой механике несостоятельны.



Учебный вопрос №12:

Прохождение частиц
сквозь потенциальный
барьер.

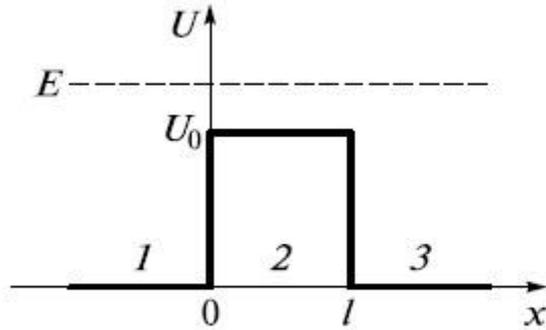


Рис. П.3

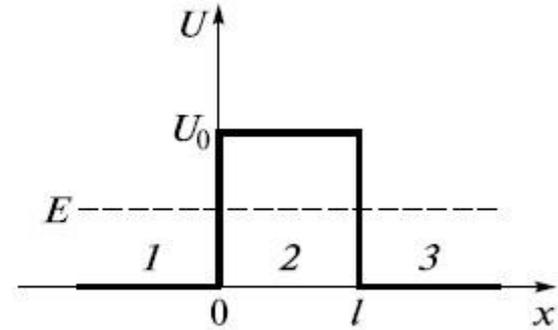


Рис. П.4

В случае $E < U_0$ (см. рис. П.4) стационарные уравнения Шредингера запишутся в виде

$$\text{область 1 и 3: } \frac{\partial^2 \psi_{1,3}}{\partial x^2} + k^2 \psi_{1,3} = 0 \left(k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \right); \quad (\text{П.7.1})$$

$$\text{область 2: } \frac{\partial^2 \psi_2}{\partial x^2} - \beta^2 \psi_2 = 0 \left(\beta = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}} \right). \quad (\text{П.7.2})$$

Общие решения этих дифференциальных уравнений для областей 1, 2 и 3:

$$\psi_1(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}, \quad (\text{П.7.3})$$

$$\psi_2(x) = A_2 e^{\beta x} + B_2 e^{-\beta x}, \quad (\text{П.7.4})$$

$$\psi_2(x) = A_2 e^{ikx} + B_2 e^{-ikx}. \quad (\text{П.7.5})$$

$$\psi_1(x, t) = \psi_1(x) e^{-\frac{i}{\hbar} Et} = A_1 e^{-\frac{i}{\hbar} (Et - p_1 x)} + B_1 e^{-\frac{i}{\hbar} (Et + p_1 x)}, \quad (\text{П.7.6})$$

где первое слагаемое представляет собой плоскую волну, распространяющуюся 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).

$$\psi_3(x) = A_3 e^{ikx}. \quad (\text{П.7.7})$$

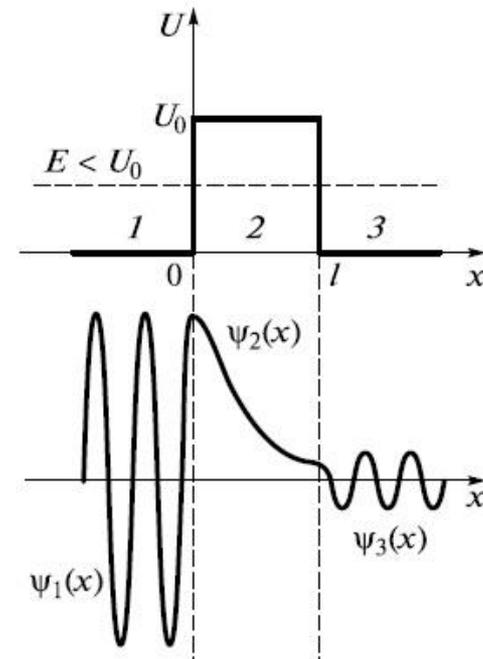


Рис. П.5

Для описания туннельного эффекта используют понятие *коэффициента прозрачности*, который, как определяется, равен отношению квадратов модулей амплитуд прошедшей и падающей волн:

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

Вновь воспользовавшись условиями для непрерывности ψ и ψ' на границах барьера $x = 0$ и $x = l$ и предположением, что коэффициент прозрачности мал по сравнению с единицей, получаем

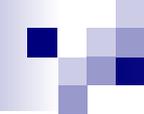
$$D = D_0 e^{-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U-E)}l}, \quad (\text{П.7.8})$$

где D_0 — постоянный множитель, который можно приравнять единице; U — высота потенциального барьера; E — энергия частицы; l — ширина барьера.

Из формулы (П.7.8) следует, что коэффициент прозрачности (вероятность проникновения сквозь потенциальный барьер) быстро убывает с увеличением ширины барьера, а также с ростом его высоты.

Подчеркнем еще раз, что *туннельный эффект* — эффект специфически квантовый, обусловленный волновыми свойствами частиц и не имеющий аналога в классической физике.

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).



Учебный вопрос №13:
Гармонический
ОСЦИЛЛЯТОР.

Линейный гармонический осциллятор — система, совершающая движение под действием квазиупругой силы $F = -kx$. **Осциллятор** называют **одномерным**, если система, например частица, движется вдоль одной прямой.

Задача о гармоническом осцилляторе в квантовой теории играет фундаментальную роль по двум причинам:

1) она встречается во всех задачах, где имеют место квантованные колебания (например, в квантовой теории поля, в теории молекулярных и кристаллических колебаний и т.д.);

2) проблемы, относящиеся к гармоническому осциллятору, — хорошая иллюстрация основных принципов и формализма квантовой механики.

Потенциальная энергия линейного гармонического осциллятора равна:

$$U = \frac{m\omega_0^2 x^2}{2}, \quad (\text{П.8.1})$$

где m — масса частицы; ω_0 — собственная частота колебаний осциллятора; x — отклонение от положения равновесия.

Гармонический осциллятор в квантовой механике — **квантовый осциллятор** — описывается уравнением Шредингера (П.4.5), учитывающим выражение (П.8.1) для потенциальной энергии. Тогда стационарные состояния квантового осциллятора определяются уравнением Шредингера вида

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{m\omega_0^2 x^2}{2} \right) \psi = 0, \quad (\text{П.8.2})$$

где E — полная энергия осциллятора.

В теории дифференциальных уравнений доказывается, что уравнение (П.8.2) имеет однозначные, конечные и непрерывные решения при собственных значениях

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_0 \quad (n = 1, 2, \dots). \quad (\text{П.8.3})$$

Из формулы (П.8.3) следует: *энергия квантового осциллятора может иметь лишь дискретные значения, т.е. квантуется*. Кроме того, уровни энергии расположены на одинаковых расстояниях друг от друга (на рис. П.6 они изображены горизонтальными прямыми), а именно расстояние между соседними энергетическими уровнями равно $\hbar \omega_0$, причем минимальное значение энергии квантового осциллятора

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega_0, \quad (\text{П.8.4})$$

она называется *энергией нулевых колебаний*.

Наличие энергии нулевых колебаний *типично для квантовых систем* и является *следствием соотношения неопределенностей*: частица не может находиться на дне потенциальной ямы *независимо от ее формы*. Если бы это было возможно, то импульс, а также его неопределенность обращались бы в нуль. Тогда неопределенность координаты $\Delta x \rightarrow \infty$, что противоречит пребыванию частицы в потенциальной яме.

Плотность вероятности обнаружить частицу на оси x определяется квадратом модуля волновой функции $|\psi(x)|^2$. На рис. П.6 представлены кривые распределения плотности вероятности $|\psi_n(x)|^2$ для различных состояний квантового осциллятора (для $n = 0, 1$ и 2). В точках A и A' , B и B' , C и C' потенциальная энергия равна полной энергии ($U_0 = E$), причем, как известно, классический осциллятор не может выйти за пределы этих точек.

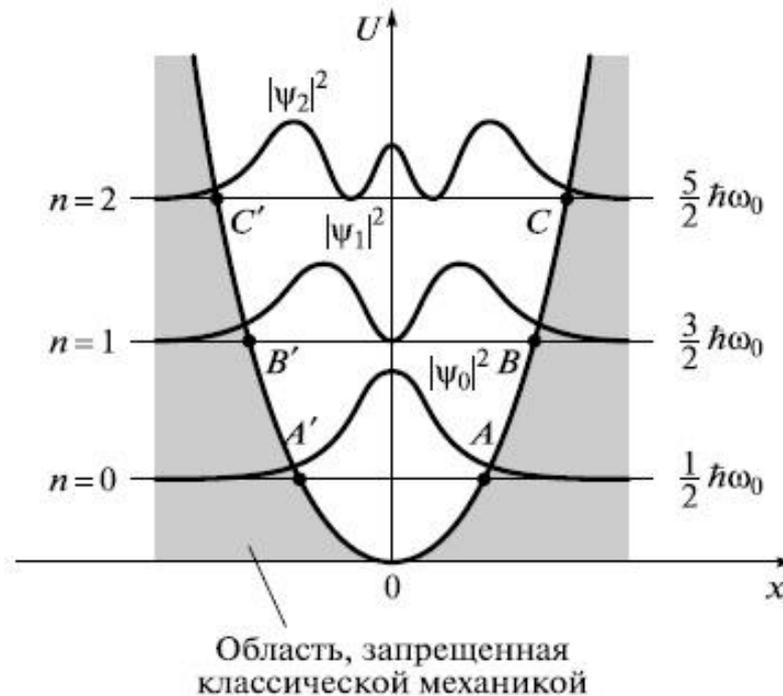


Рис. П.6

Для квантового осциллятора $|\psi_n(x)|^2$ и за пределами этих точек имеет конечные значения. Это означает, в свою очередь, что имеется конечная, *хотя и небольшая*, вероятность обнаружить частицу за пределами «потенциальной ямы». Этот результат не противоречит выводам квантовой механики, поскольку равенство $T = E - U$ в квантовой механике не имеет силы, так как кинетическая (T) и потенциальная (U) энергии не являются одновременно измеримыми величинами.