

# Твердотельная электроника

Презентации к лекционному курсу

**Уравнение Шрёдингера,  
волновая функция**

В 1924 г. французский физик Луи де Бройль предположил, что любая частица, в том числе и электрон, обладает волновыми свойствами с длиной волны

$$\lambda = h/\overline{p}$$

где  $h=6,62 \cdot 10^{-34}$  Дж·с= $4,5 \cdot 10^{-15}$  эВ·с  
– постоянная Планка;

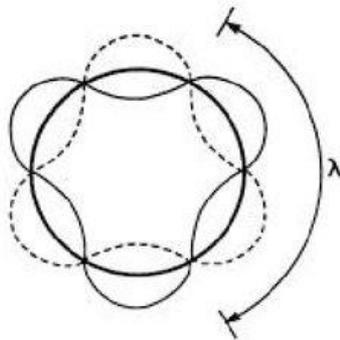
— — ИМПУЛЬС

Луи Виктор Пьер Раймон, 7-й герцог **Брольи**, более известный как **Луи де Бройль** ([фр.](#) *Louis-Victor-Pierre-Raymond, 7ème duc de Broglie, Louis de Broglie*; [15](#); 15 08 [1892](#); 15 08 1892 — [19](#); 15 08 1892 — 19 03 [1987](#); 15 08 1892 — 19 03 1987) — французский [физик](#); 15 08 1892 — 19 03 1987) — французский физик-[теоретик](#); 15 08 1892 — 19 03 1987) — французский физик-теоретик, лауреат [Нобелевской премии по физике](#) за 1929



- Гипотеза де Бройля позволяет дать интерпретацию боровского правила квантования момента импульса электрона в атоме водорода: это правило эквивалентно условию для стоячих волн: на длине волны окружности, соответствующей орбите электрона в атоме должно укладываться целое число длин волн.

$$2\pi r = \frac{nh}{mV} = \frac{nh}{p} = n\lambda \quad . \quad (14.6)$$



For a hydrogen atom:

Electron wave resonance

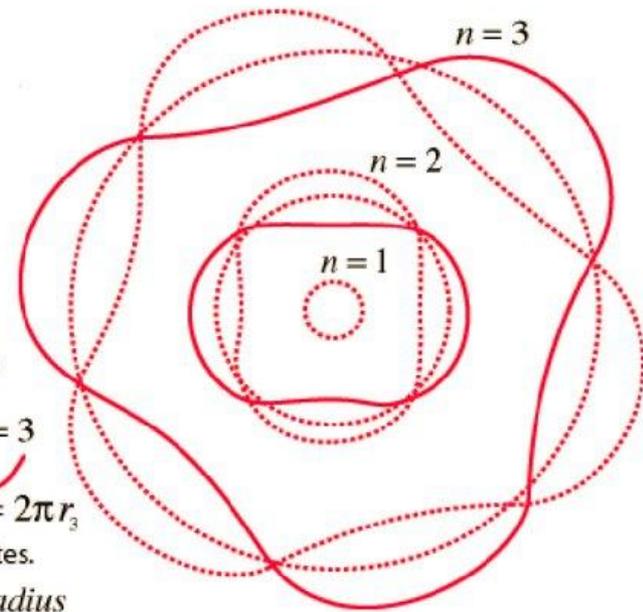
$$n=1 \quad \lambda_1 = 2\pi r_1 = 6.28a_0$$

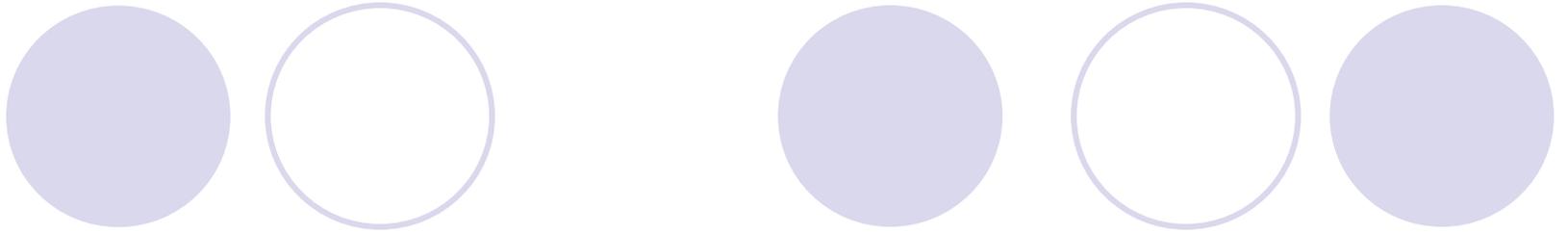
$$n=2 \quad 2\lambda_2 = 2\pi r_2 \\ \lambda_2 = 12.57a_0$$

$$n=3 \quad 3\lambda_3 = 2\pi r_3 \\ \lambda_3 = 18.85a_0$$

Wavelengths for hydrogen states.

$$a_0 = 0.0529\text{nm} = \text{Bohr radius}$$





Можно ввести понятие *волнового числа*, то есть числа волн, укладывающихся на  $2 \pi$  см

$$\bar{k} = 2\pi / \lambda = \bar{p} / \hbar$$

$\hbar = h / 2\pi = 1,054 \cdot 10^{-34}$  Дж с – приведенная постоянная Планка или постоянная Дирака

Тогда можно связать импульс с волновым вектором:

$$\bar{p} = \hbar \cdot \bar{k}$$

В этом случае

— называют квазиимпульсом  $\bar{p}$  электрона



Кинетическая энергия свободного электрона

$$E = m_0 \cdot c^2 = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = \frac{2\pi\hbar \cdot c}{\lambda} = \hbar \cdot k \cdot c =$$
$$= \hbar \cdot p \cdot c = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} = \frac{\hbar^2 \bar{k}^2}{2m_0}$$

$m_0 = 9,1 \cdot 10^{-31}$  кг – масса свободного электрона

В 1926 г. австрийский физик Эрвин Шрёдингер вывел уравнение для волн де Бройля. Волна, связанная с отдельной частицей описывается *волновой функцией*, зависящей от координат и времени  $\Psi(r, t)$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H} \cdot \Psi(\vec{r}, t) \quad (2)$$

В левой части – скорость изменения волновой функции, умноженная на мнимую единицу ( $i^2 = -1$ ) и приведенную постоянную Планка.

В правой – *оператор Гамильтона*  $\hat{H}$ , действующий на волновую функцию

# Уравнение Шрерингера



Э́рвин Ру́дольф Йо́зеф  
Алекса́ндр Шре́дингер  
(нем. *Erwin Rudolf Josef  
Alexander Schrödinger*

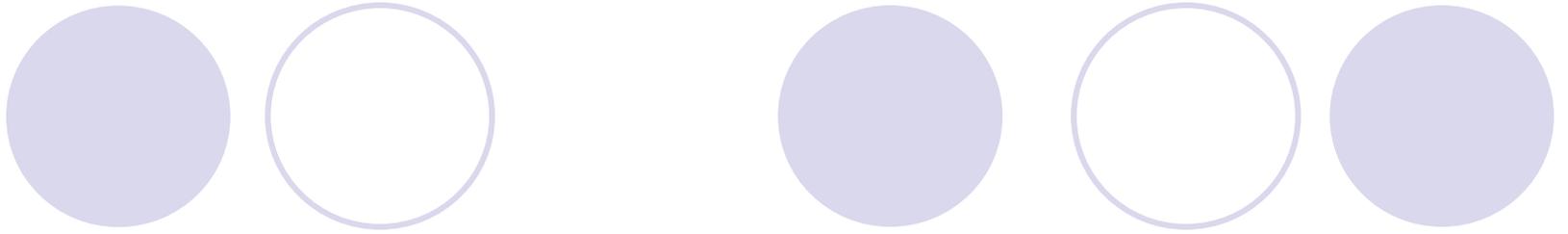
12 12 08 1887 12 08 1887 — 4  
12 08 1887 — 4 01 1961 12  
08 1887 — 4 01 1961) —  
австрийский физик-теоретик,  
Лауреат Нобелевской премии  
по физике 12 08 1887 — 4  
01 1961) — австрийский  
физик-теоретик,  
Лауреат Нобелевской премии  
по физике (1933)

# Квантовые операторы

символические изображения математических операций преобразования величин в квантовой теории. В квантовой механике постулируется, что каждой физической величине, описываемой в классической механике функцией  $F(x, y, z, p_x, p_y, p_z)$  координат и импульсов, ставится в соответствие линейный оператор  $\hat{F}(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$  действующий на волновую функцию  $\Psi(x, y, z, t)$ . Под оператором  $\hat{F}$  понимается правило, по которому одной функции  $\Psi(x, y, z, t)$  переменных  $x, y, z, t$  сопоставляется другая функция  $\chi(x, y, z, t)$

тех же переменных

$$\chi(x, y, z, t) = \hat{F}\Psi(x, y, z, t)$$



- Например: оператор может означать дифференцирование по какой-либо переменной

$$\chi(x, y, z, t) = \hat{F}\Psi(x, y, z, t) = \frac{\partial\Psi(x, y, z, t)}{\partial x}$$

$$\hat{F} = \frac{\partial}{\partial x}$$

# Примеры некоторых операторов

- Оператор координаты  $\hat{x}$  равен самой координате  $x$ , т.е. сводится к умножению на эту переменную:  $\hat{x} = x$
- Оператор полной энергии (гамильтониан)  $\hat{H}$  получается из выражения  $\hat{H}\Psi = E \cdot \Psi(\bar{r}, t)$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\bar{r}, t)}{\partial t} = E \cdot \Psi(\bar{r}, t)$$

где  $E$  – собственная энергия частицы (системы частиц).

- 
- Энергия частицы массой  $m_0$  имеет две составляющие – кинетическую и потенциальную:  $E = E_k + U_n$
  - В этом случае  $\hat{H} = \hat{E} + \hat{U}$ , где  $\hat{E}$  – оператор кинетической энергии,  $\hat{U}$  – оператор потенциальной энергии.

$$\hat{E} = \frac{\hat{p}^2}{2m_0} = \frac{1}{2m_0} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) = \frac{1}{2m_0} \Delta$$

# Примеры некоторых гамильтонианов

- Свободная частица массы  $m_0$ :

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2$$

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2}$$

- оператор Лапласа

# Примеры некоторых гамильтонианов

- Частица в одномерной потенциальной яме  $U(x)$ ,  $0 \leq x \leq w$ :

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \left( \frac{d^2}{dx^2} \right) + U(x)$$

# Кинетическая энергия

$$E_k = \frac{p^2}{2m_0}$$

- Если заменить в правой части уравнения величину импульса на так называемый оператор импульса,

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla = -i\hbar \nabla$$

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial x_i} \bar{i} + \frac{\partial}{\partial y_i} \bar{j} + \frac{\partial}{\partial z_i} \bar{k}$$

- – оператор Гамильтона или набла

# операторы проекций импульсов

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}$$

$$\hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$$

# уравнения для собственных функций и собственных значений операторов проекций ИМПУЛЬСОВ

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi_{p_x}}{\partial x} = -i\hbar \frac{\partial \Psi_{p_x}}{\partial x} = \hat{p}_x \Psi_{p_x} \\ \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi_{p_y}}{\partial y} = -i\hbar \frac{\partial \Psi_{p_y}}{\partial y} = \hat{p}_y \Psi_{p_y} \\ \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi_{p_z}}{\partial z} = -i\hbar \frac{\partial \Psi_{p_z}}{\partial z} = \hat{p}_z \Psi_{p_z} \end{array} \right. (3)$$

Решением первого уравнения системы является волновая функция

$$\Psi_{p_x} = \Psi_0(y, z) \cdot e^{\frac{ip_x x}{\hbar}}$$

где  $\Psi_0(y, z)$  - произвольная функция  $(y, z)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 \Psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2 \Psi(\vec{r}, t)}{\partial \vec{r}^2} = E \cdot \Psi(\vec{r}, t)$$

- уравнение Шредингера для свободной частицы

# Уравнение Шредингера для свободной частицы

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 \Psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2 \Psi(\vec{r}, t)}{\partial r^2} = E \cdot \Psi(\vec{r}, t)$$

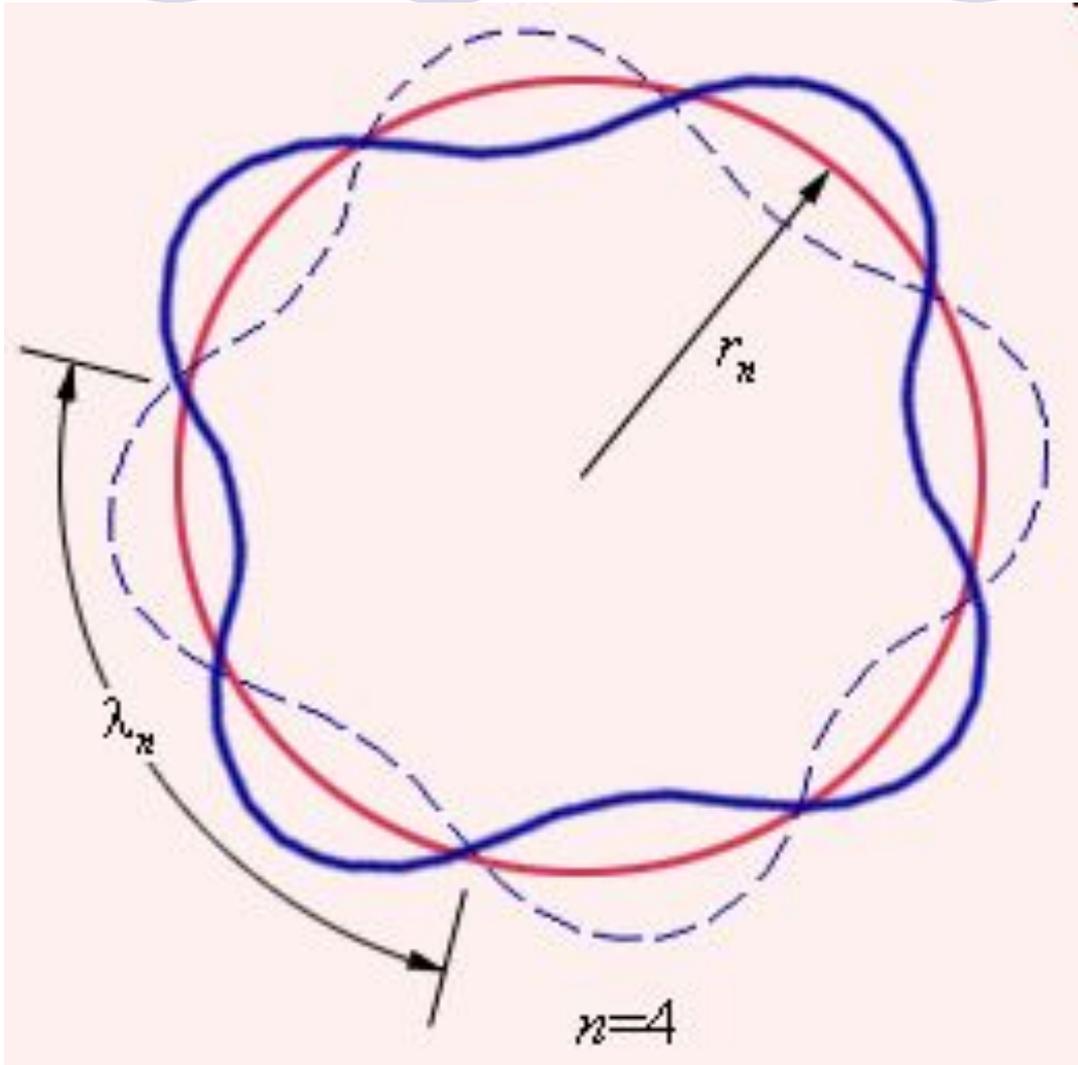
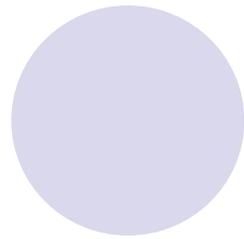
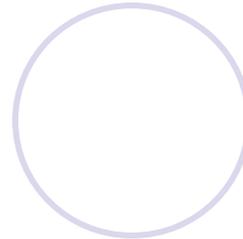
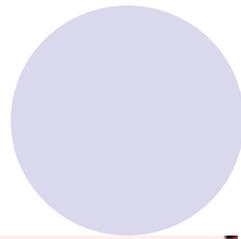
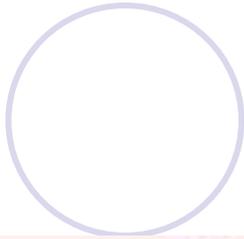
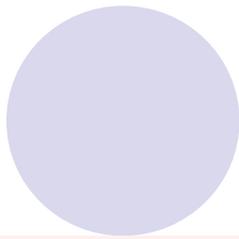
- Решения уравнения Шрёдингера существуют только для волновых функций, характеризуемых набором целых чисел (которые называют квантовыми):  $n$ ,  $l$ ,  $m$  и соответствующих им дискретных значений энергий

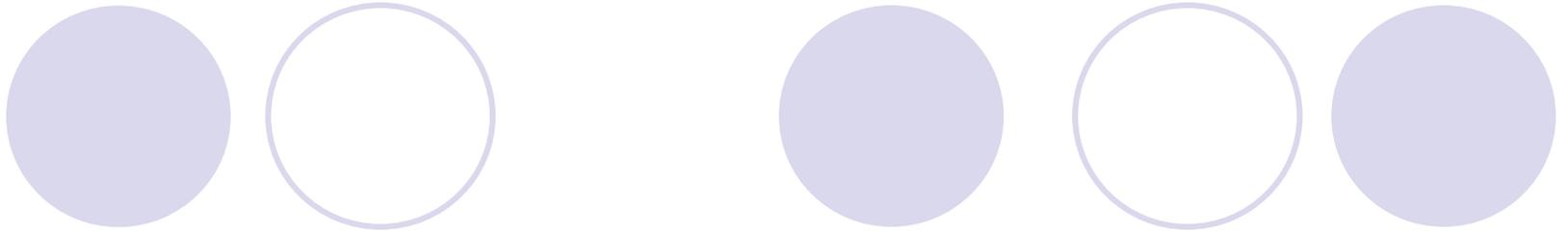
# Уравнение Шредингера для свободной частицы

- В стационарном случае

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 \Psi(\vec{r}, t) = E \cdot \Psi(\vec{r}, t) = 0$$

- Шредингер заметил, что при определенных условиях решение его волнового уравнения представляют собой **стоячие волны**, и связал эти решения со стационарными состояниями атомов.





- Учитывая потенциальную энергию электрона

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 \Psi(\bar{r}, t) + U(\bar{r}) \Psi(\bar{r}, t) = E \cdot \Psi(\bar{r}, t)$$

- Это уравнение в частных производных имеет множество решений. В каждой конкретной задаче из этого множества следует выбрать одно решение, отвечающее условиям задачи

**Временное уравнение Шредингера**, описывающее зависимость от времени волновой функции частицы в силовом поле  $U(\mathbf{r})$ :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + U\Psi \quad , \quad (14.11)$$

где  $i$  – мнимая единица;  $\hbar = h/2\pi = 1,05 \cdot 10^{-34}$  Дж · с - постоянная Планка,  $m$  и  $U$  – масса и потенциальная энергия частицы.

В состоянии с определенной энергией  $E$  (стационарном состоянии) волновая функция имеет вид

$$\Psi(\vec{r}, t) = \Psi(\vec{r}) \exp\left(-i \frac{E}{\hbar} t\right) . \quad (14.12)$$

**Стационарное уравнение Шредингера**, описывающее поведение пространственной части волновой функции частицы, находящейся в стационарном состоянии:

$$\nabla^2 \Psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \Psi = 0 . \quad (14.13)$$

**Одномерное стационарное уравнение Шредингера**

$$\frac{d^2 \Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \Psi = 0 . \quad (14.14)$$

В любой момент времени  $t$ , состояние квантовой частицы задается двумя величинами: координатами (радиусом-вектором) и импульсом:

$$\Psi(\bar{r}, t) = \Psi_0(\bar{r}, t) \cdot \exp\left[\frac{i}{\hbar} \cdot (\bar{p} \cdot \bar{r} - E \cdot t)\right] \quad (4)$$

$E = h\nu = \hbar\omega$  – энергия свободного электрона,

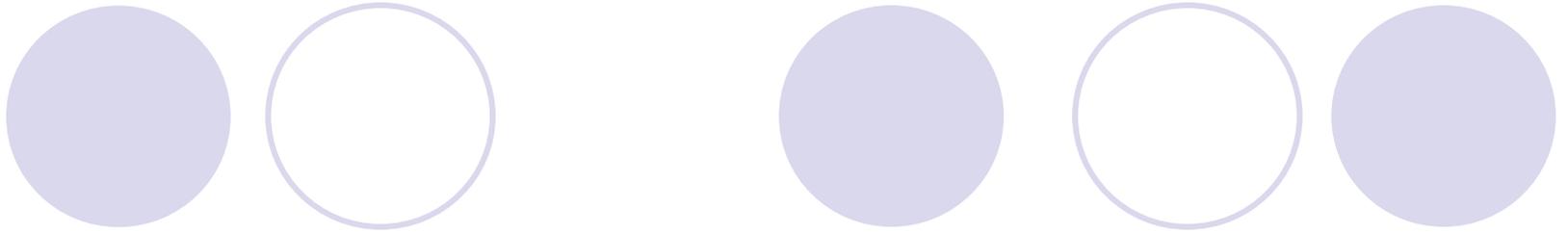
$\omega = 2\pi \cdot \nu = \frac{2\pi}{T}$  – циклическая частота,  
 $T$  – период.

# Волновая функция

$$\Psi(\bar{r}, t) = \Psi_0(\bar{r}, t) \cdot \exp\left[\frac{i}{\hbar} \cdot (\bar{p} \cdot \bar{r} - E \cdot t)\right]$$

$$\begin{aligned} \Psi(\bar{r}, t) &= \Psi_0(\bar{r}, t) \cdot \exp[i \cdot (\bar{k} \cdot \bar{r} - \omega t)] = \\ &= \Psi_0(\bar{r}, t) \cdot [\cos(\bar{k} \cdot \bar{r} - \omega t) + i \cdot \sin(\bar{k} \cdot \bar{r} - \omega t)] \end{aligned}$$

Это – комплексная синусоида.



- Решения в виде стоячей волны зависят от времени благодаря множителю
- $\exp[-i \cdot \omega t]$ , причем возможные значения частоты образуют дискретный ряд  $\omega_1, \omega_2, \dots$ , и, таким образом, энергия  $n$ -го стационарного состояния равна

$$E_n = \hbar \omega_n$$

# Волновая функция

$$\Psi(\bar{r}, t) = \Psi_0(\bar{r}, t) \cdot \exp[i \cdot (\bar{k} \cdot \bar{r} - \omega t)](5)$$

Если нам известна волновая функция (5), то из нее можно получить энергию, продифференцировав ее по времени один раз и квадрат импульса продифференцировав ее по координате дважды:

$$\frac{\partial^2 \Psi(\bar{r}, t)}{\partial \bar{r}^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2} \cdot \Psi(\bar{r}, t)$$

$$\frac{\partial \Psi(\bar{r}, t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} E \cdot \Psi(\bar{r}, t)$$

# Волновая функция

$$p^2 = -\frac{\hbar^2}{\Psi(\bar{r}, t)} \cdot \frac{\partial^2 \Psi(\bar{r}, t)}{\partial \bar{r}^2} \quad E = -\frac{\hbar}{i} \cdot \frac{1}{\Psi(\bar{r}, t)} \cdot \frac{\partial \Psi(\bar{r}, t)}{\partial t}$$

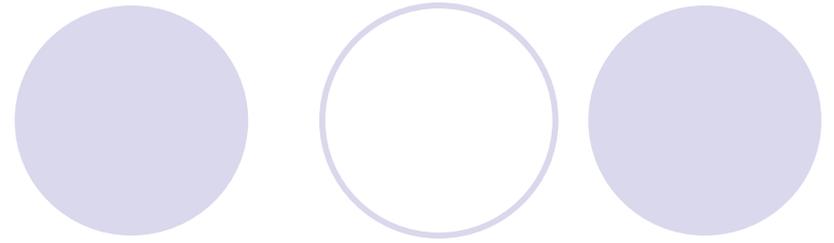
$$E \cdot \Psi(\bar{r}, t) = -\frac{\hbar}{i} \cdot \frac{1}{\Psi(\bar{r}, t)} \cdot \frac{\partial \Psi(\bar{r}, t)}{\partial t} \cdot \Psi(\bar{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2 \Psi(\bar{r}, t)}{\partial \bar{r}^2}$$

$$-\frac{\hbar}{i} \cdot \frac{1}{\Psi(\bar{r}, t)} \cdot \frac{\partial \Psi(\bar{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2 \Psi(\bar{r}, t)}{\partial \bar{r}^2} \cdot \frac{1}{\Psi(\bar{r}, t)}$$

$$\Rightarrow E = \frac{p^2}{2m_0}$$

# Как определить саму волновую функцию?

- В соответствии с соотношением неопределенностей немецкого физика Вернера Гейзенберга, выведенного им в 1927 г., координату и импульс любой микрочастицы нельзя измерить точно одновременно:  $\Delta \bar{x} \cdot \Delta \bar{p} \leq h$   
(для одномерного движения, чем точнее значение координаты, тем менее точно можно измерить значение импульса)



- **Вёрнер Карл Гейзенберг**
- (нем. *Werner Karl Heisenberg*;
- 5 5 12 1901 5 12 1901 — 1 5  
12 1901 — 1 02 1976 5  
12 1901 — 1 02 1976) —  
немецкий 5 12 1901 — 1  
02 1976) —  
немецкий физик 5  
12 1901 — 1 02 1976) —

## Принцип неопределенности Гейзенберга

Другим выражением корпускулярно-волнового дуализма квантовых частиц является принцип неопределенности Гейзенберга (немецкий физик Вернер Гейзенберг, 1927 г.), в частности, утверждающий, что любая квантовая частица не может находиться в состояниях, в которых ее координаты и импульс одновременно принимают определенные точные значения.

Например, для координаты частицы и проекции импульса частицы на ось соотношение неопределенностей имеет вид

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar \quad . \quad (14.8)$$

где  $\Delta x$  - неопределенность значения координаты  $x$  частицы;  $\Delta p_x$  - неопределенность проекции импульса частицы на ось  $x$  .

Отсюда следует, что одновременно точно измерить координату частицы и соответствующую проекцию импульса невозможно: чем меньше погрешность измерения координаты, тем больше погрешность измерения импульса:

$$\Delta p_x \geq \hbar / \Delta x \quad . \quad (14.9)$$

## Принцип неопределенности Гейзенберга

Другая формулировка соотношения неопределенностей касается энергии и времени и имеет вид

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar , \quad (14.10)$$

где  $\Delta E$  - неопределенность энергии некоторого состояния физической системы;  $\Delta t$  - промежуток времени, в течение которого это состояние существует.

Из соотношения (14.10) следует, что, если физическая система (объект измерения) находится в стационарном состоянии, то энергию системы даже в этом состоянии можно измерить лишь с точностью, не превышающей

$$\hbar / \Delta t ,$$

где  $\Delta t$  - длительность измерения.

Причина – во взаимодействии физической системы с измерительным прибором и соотношение неопределенностей применительно к данному случаю означает, что энергию взаимодействия между измерительным прибором и исследуемой системой можно учесть лишь с точностью до

$$\hbar / \Delta t$$

- 
- Максимум, что можно сделать – это определить три координаты или три компоненты импульса, а затем из уравнения Шрёдингера вычислить волновую функцию в какой угодно последующий момент времени.
  - При решении конкретных задач уравнение Шредингера должно быть дополнено заданием начальных условий: для момента времени  $t=0$ , т.е. нужно задать функцию

$$\Psi(\bar{r}, t) = \Psi_0(\bar{r}, 0)$$

# Так что такое волновая функция?

- В 1926 г. немецкий физик Макс Борн предложил, что волновая функция физического смысла не имеет, но определяет вероятность пребывания электрона в заданной точке. В тех областях, где амплитуда волны больше, обнаружение электрона более вероятно.



- **Макс Борн**

(нем. *Max Born*; 11;  
1112 1882; 1112 1882  
- 5; 1112 1882 - 5  
01 1970; 1112 1882 - 5  
01 1970) — немецкий и  
британский физик;  
1112 1882 - 5  
01 1970) — немецкий и  
британский физик-  
теоретик и математик;  
1112 1882 - 5

# Волновая функция

- Шредингеровская волновая функция (амплитуда волны де Бройля) определяет вероятность нахождения частицы в данной точке пространства и времени. Если мы пытаемся установить положение частицы в данный момент времени  $t$ , то *вероятность* обнаружить частицу в малом объеме пропорциональна  $dV = d^3(\vec{r})$

$$|\Psi(\vec{r}, t)|^2 \cdot dV = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 \cdot d^3(\vec{r})$$

# Вероятность обнаружить данную частицу в объеме $dV$

$$w = \left| \Psi(\bar{r}, t) \right|^2 = \Psi(\bar{r}, t) \cdot \Psi(\bar{r}, t)^*$$

- здесь  $\Psi(\bar{r}, t)^*$  – комплексно-сопряженная с функцией  $\Psi(\bar{r}, t)$

$$\Psi(\bar{r}, t)^* = \Psi_0 \exp[-i(\bar{k} \cdot \bar{r} - \omega \cdot t)]$$

- Согласно Постулата №1 квантовой механики *Состояние частицы (или системы частиц) задано, если известна волновая функция*

## Ограничения на вид волновой функции:

- 1) Волновая функция должна существовать и удовлетворять уравнению Шредингера.
- 2) Волновая функция и ее первая производная должны принимать конечные значения.
- 3) Волновая функция и ее первая производная должны быть однозначными.
- 4) Условие нормировки:

$$\int |\Psi|^2 dV = 1 \quad . \quad (14.15)$$

В одномерном случае вероятность обнаружить частицу в интервале от  $x_1$  до  $x_2$ :

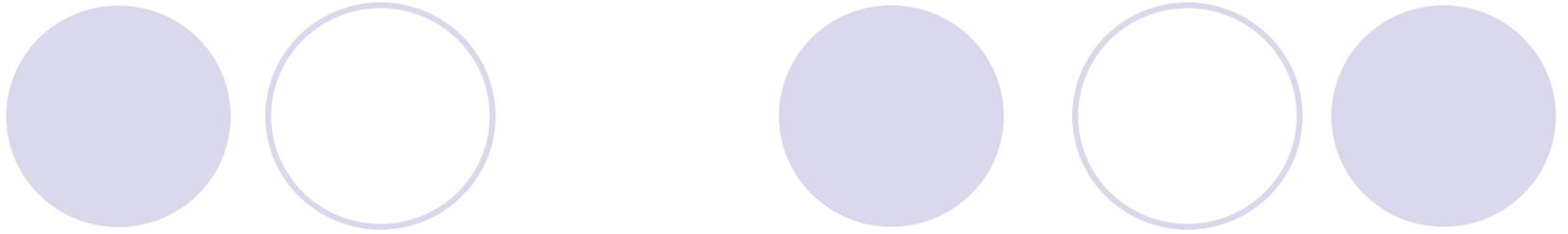
$$P = \int_{x_1}^{x_2} |\Psi(x)|^2 dx \quad . \quad (14.16)$$

Для свободной частицы  $U(\vec{r}) = 0$

$$\Psi(x) = A \exp[-i(\omega t - kx)] + B \exp[i(\omega t - kx)]$$

$$k = 2\pi/\lambda = p/\hbar = \sqrt{2m_0 E} / \hbar \qquad \omega = E/\hbar$$

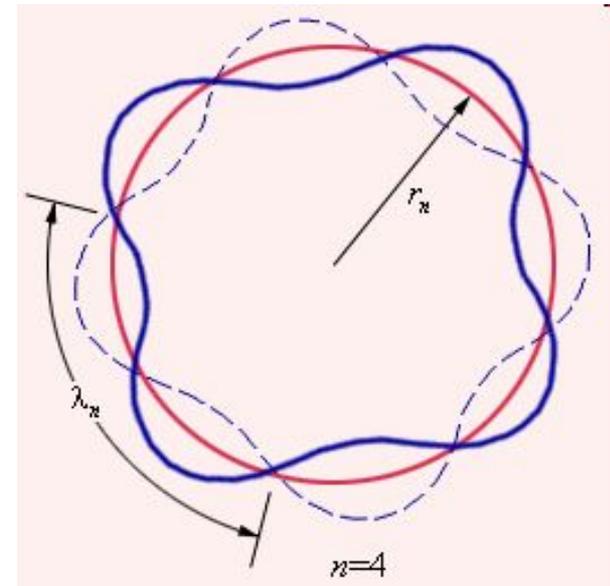
Таким образом, для свободной частицы общее решение представляется в виде двух монохроматических волн, распространяющихся вдоль оси  $X$  в противоположных направлениях с амплитудами  $A$  и  $B$  соответственно



- Если взять волну де Бройля, идущую в сторону положительных значений оси  $X$ , то  $\Psi(\bar{r}, t) \cdot \Psi(\bar{r}, t)^* = |A|^2$
- и значит, плотность вероятности нахождения частицы не зависит от координаты.

# Атомная орбиталь

- Геометрический образ, соответствующий и представляющий область **наиболее вероятного пребывания электрона в атоме**, называют *атомной орбиталью* данного электронного состояния. Кстати, из-за неопределенности координат нельзя говорить и о траектории электрона, в частности об орбитах электронов в атомах.



- При условии стационарности поля внешних сил (  $E(t) = const$  ) волновую функцию  $\Psi(\bar{r}, t)$  можно представить в следующем виде:  $\Psi(\bar{r}, t) = \Psi(\bar{r})\varphi(t)$ , что дает возможность после разделения переменных получить два уравнения для временной и координатной частей функции соответственно. Так для одномерного случая уравнение можно записать в виде:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + E(x) \cdot \Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t}$$

- После разделения переменных можно получить два уравнения для временной и координатной частей функции соответственно:

$$E \cdot \varphi(t) = i\hbar \frac{\partial \varphi(t)}{\partial t}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) = [E - U(x)]\Psi(x)$$

$$\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) + [E - U(x)]\Psi(x) = 0$$

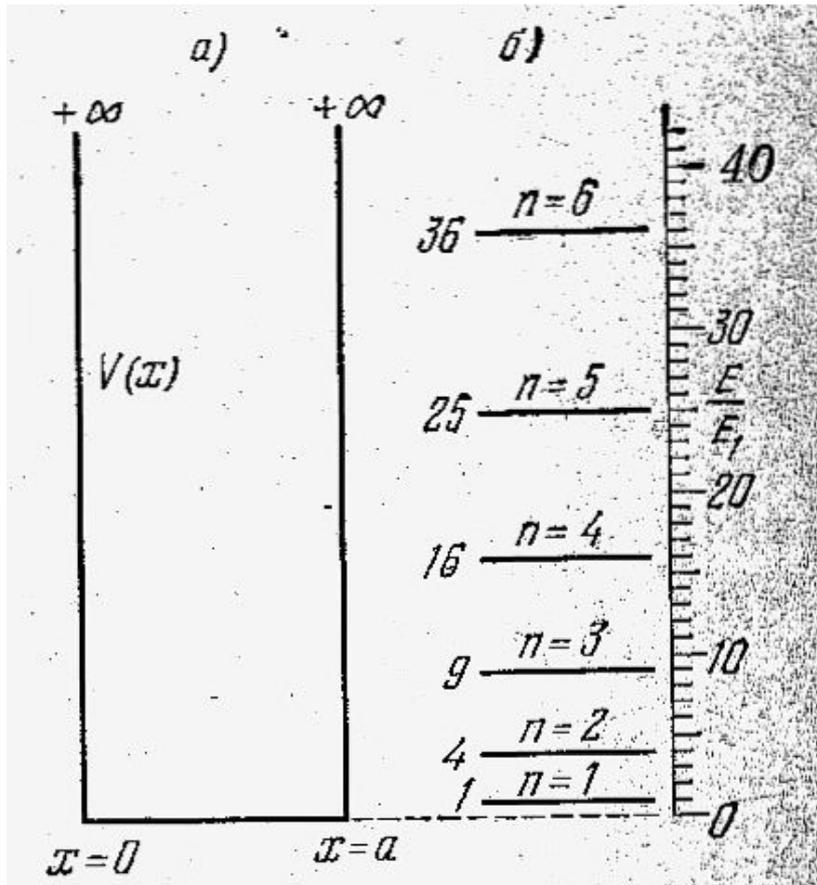
$$\frac{d^2 \Psi(x)}{dx^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2} [E - U(x)]\Psi(x) = 0$$

- Решение уравнения с точностью до множителя  $C$  будет иметь во всех случаях один и тот же вид:

$$\varphi(t) = C \cdot \exp\left(-i \frac{E}{\hbar} t\right)$$

- Для нахождения вида функции  $\Psi(x)$  в уравнение необходимо подставлять зависимость  $U(x)$  в каждом конкретном случае. Однако точное решение уравнения можно получить только для некоторых  $U(x)$  причем, обычно это удается сделать лишь при определенных (собственных) значениях энергии  $E$ .

# Решение уравнение Шредингера частицы, находящейся в потенциальной яме



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

$$0 < x < a$$

$$\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2} E\Psi(x, t) = 0$$

$$\Psi(0) = 0 \quad \Psi(a) = 0$$

# Решение уравнение Шредингера частицы, находящейся в потенциальной яме

- Вводя обозначение  $k = \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2} E}$

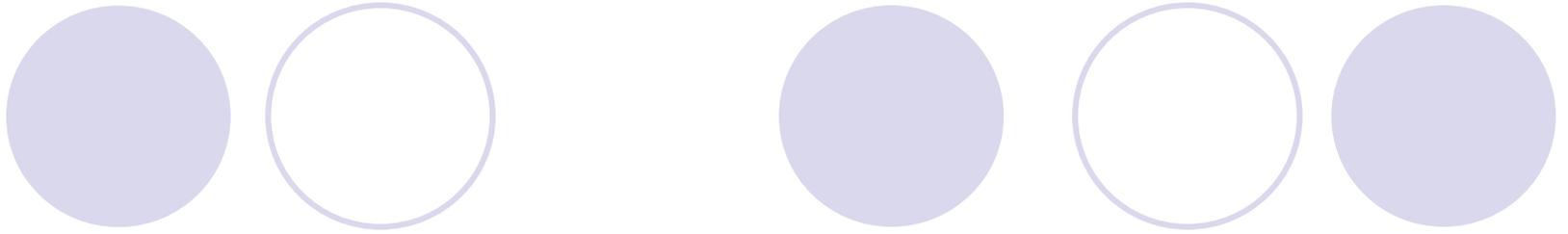
$$\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + k^2\Psi(x) = 0$$

$$\Psi_2(x) = A \cdot \sin(kx) + B \cdot \cos(kx), 0 < x < a$$

- $\Psi(0) = 0 \quad B=0 \quad \Psi(a) = A \cdot \sin(ka) = 0$

$$A \cdot \sin(ka) = 0 \quad ka = \pi n$$

$$k = \pi n / a$$



## Решение уравнение Шредингера частицы, находящейся в потенциальной яме

- Заметим, что условие  $k = \pi n/a$  соответствует образованию в области  $0 < x < a$  стоячей волны ( $\lambda = 2\pi/k$ ), когда в пределах этой области укладывается полуволн

$$\left( n = \frac{a}{\lambda/2} \right)$$

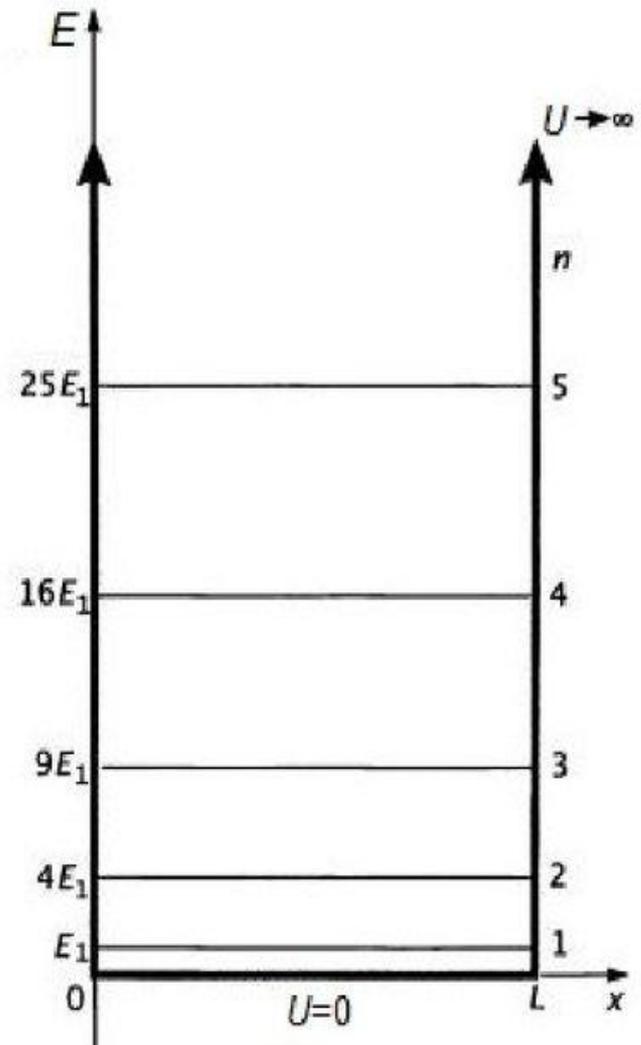
## Микрочастица в «ящике»

(в бесконечно глубокой одномерной прямоугольной потенциальной яме)

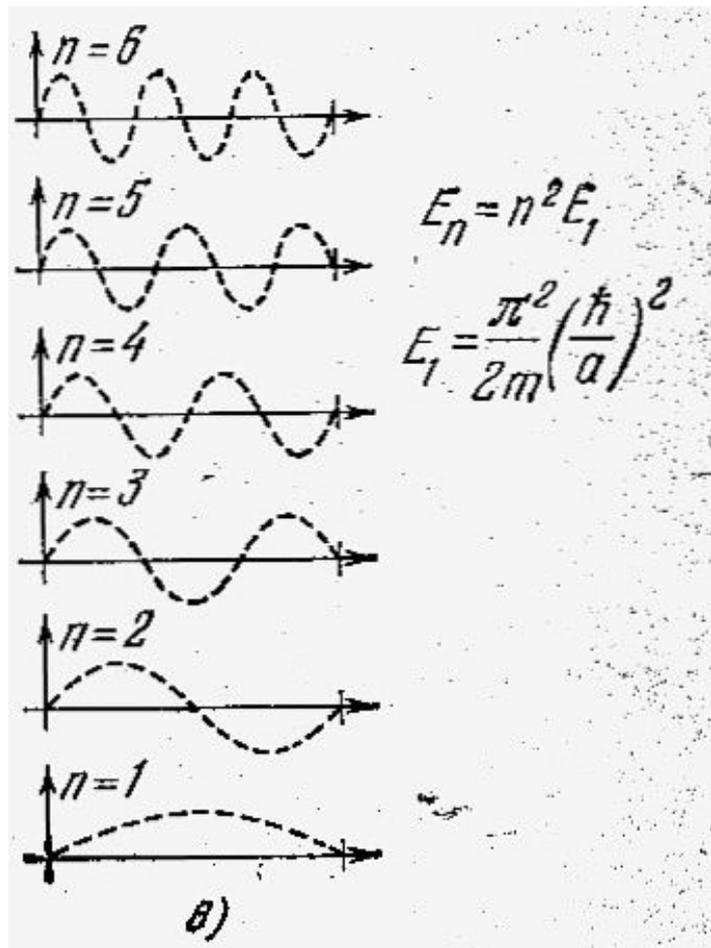
Энергия микрочастицы, находящейся в бесконечно глубокой одномерной прямоугольной потенциальной яме, **квантуется** т.е. может принимать только дискретный набор значений.

Энергия  $n$ -го уровня (энергия  $n$ -го стационарного состояния)

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} = n^2 E_1 \quad . \quad (14.20)$$



# Решение уравнение Шредингера частицы, находящейся в потенциальной яме



$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_n^* a^2} n^2$$

где  $n=1, 2, 3\dots$

## Решение уравнение Шредингера частицы, находящейся в потенциальной яме

- Случай  $n=0$  следует отбросить, так как при этом волновая функция всюду равна нулю, что лишено физического смысла, так как это означает, что частица в яме отсутствует.
- Состояние частицы, в которой она обладает наименьшей энергией ( $n=1$ ), называется *основным состоянием*. Все остальные состояния являются *возбужденными*.

# Решение уравнение Шредингера частицы, находящейся в потенциальной яме

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_n \cdot a^2}$$

$$\begin{aligned} \Delta E_n &= E_{n+1} - E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_n^* a^2} (n+1)^2 - \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_n^* a^2} n^2 = \\ &= \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_n^* a^2} (n^2 + 2n + 1 - n^2) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_n^* a^2} (2n + 1) \end{aligned}$$

# Решение уравнение Шредингера частицы, находящейся в потенциальной яме

- Как энергия состояния, так и разность энергий соседних состояний ( $\Delta E_n$  – расстояние между уровнями энергии) увеличивается с ростом уровня  $n$  и зависит от массы частицы и ширины потенциальной ямы: с увеличением массы (переход к макрообъектам) и ширины области, в которой заключена частица (переход к свободным частицам), расстояние между уровнями энергии  $\Delta E_n$  уменьшается и в пределе становится равным нулю, другими словами, **значения энергий для свободных микрочастиц и макрообъектов не квантуются.**

Решение уравнение Шредингера частицы,  
находящейся в потенциальной яме

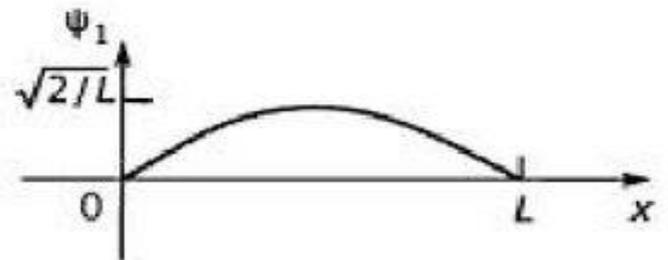
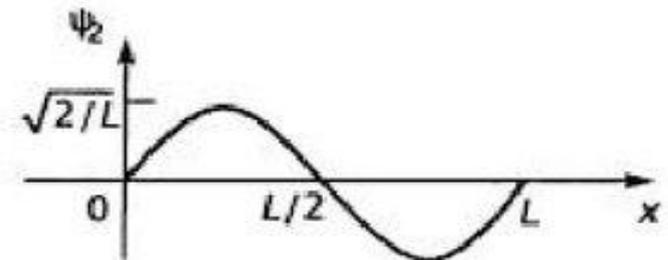
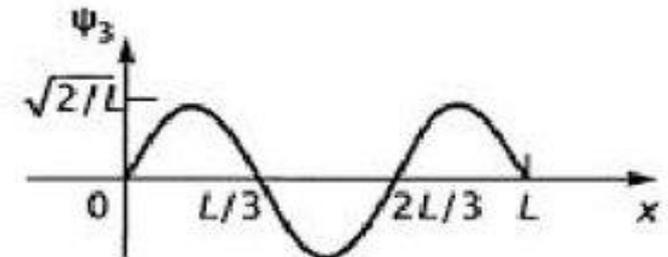
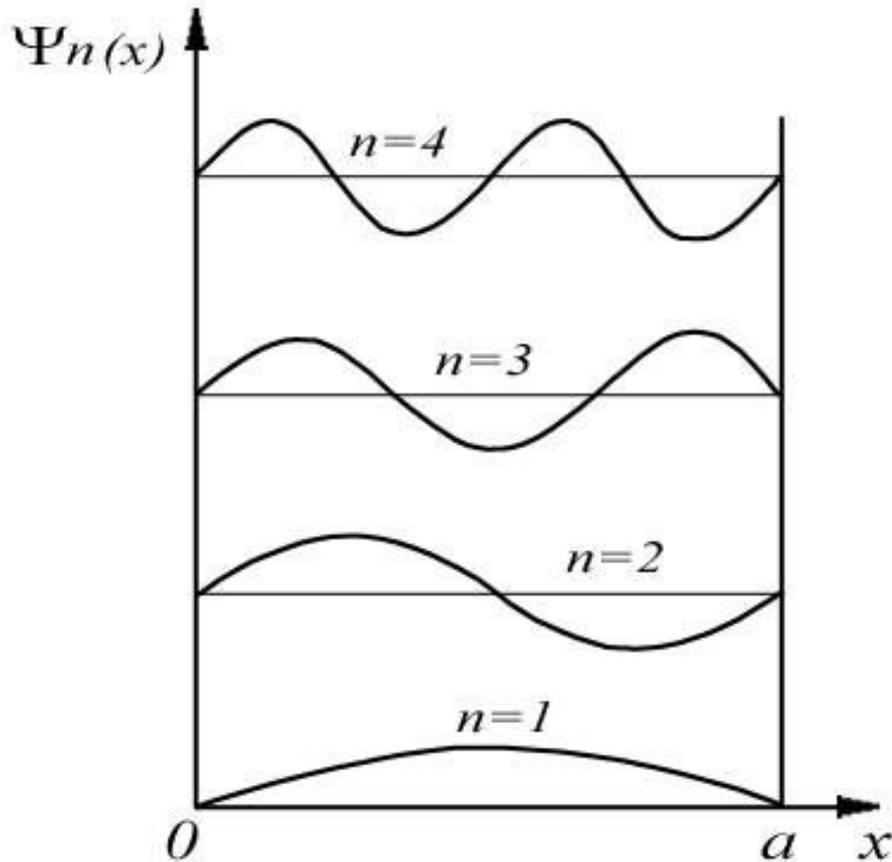
- Каждому значению соответствует собственная волновая функция

$$\Psi(x) = A \cdot \sin \frac{\pi n x}{a}$$

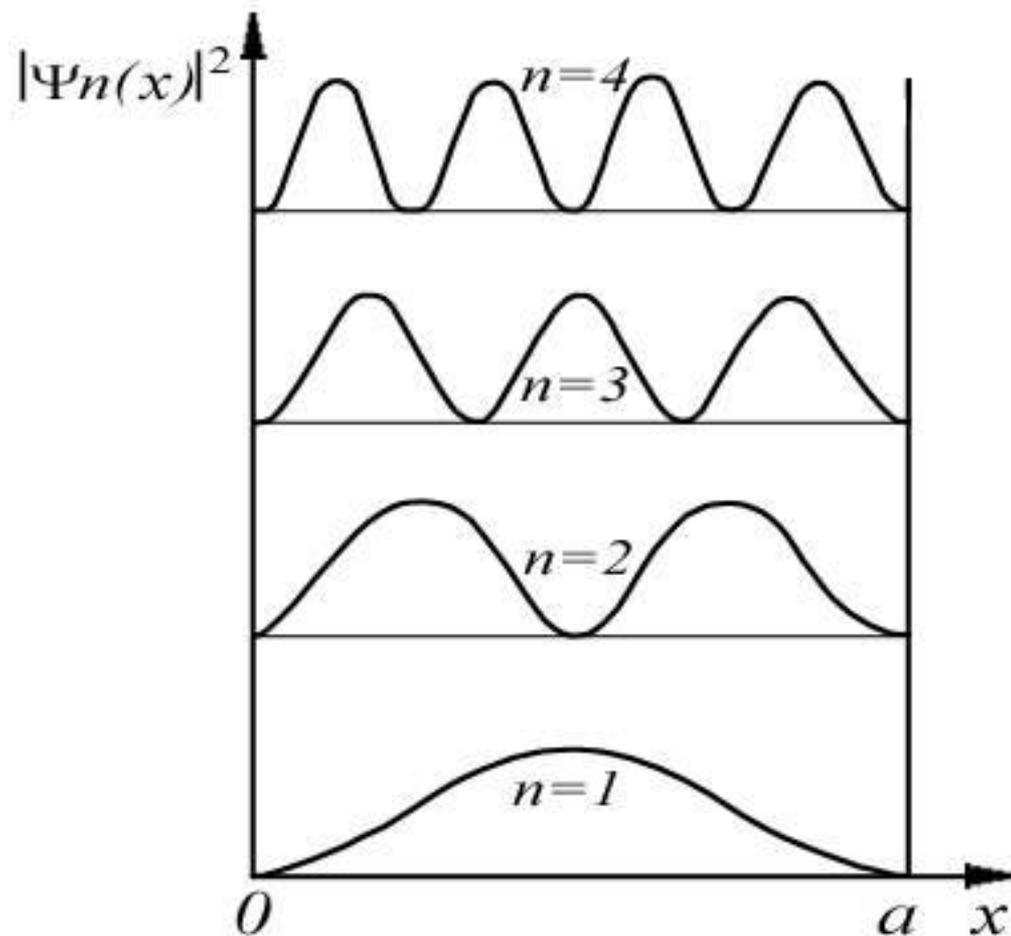
$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi_n(x, t)|^2 = A^2 \int_0^a \sin^2 \left( \frac{\pi x}{a} n \right) = A^2 \frac{2}{a} = 1 \quad A = \sqrt{2/a}$$

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \left( \frac{\pi x}{a} n \right)$$

# Волновые функции частицы в потенциальной яме с непроницаемыми стенками



# Плотность вероятности нахождения частицы для различных квантовых состояний

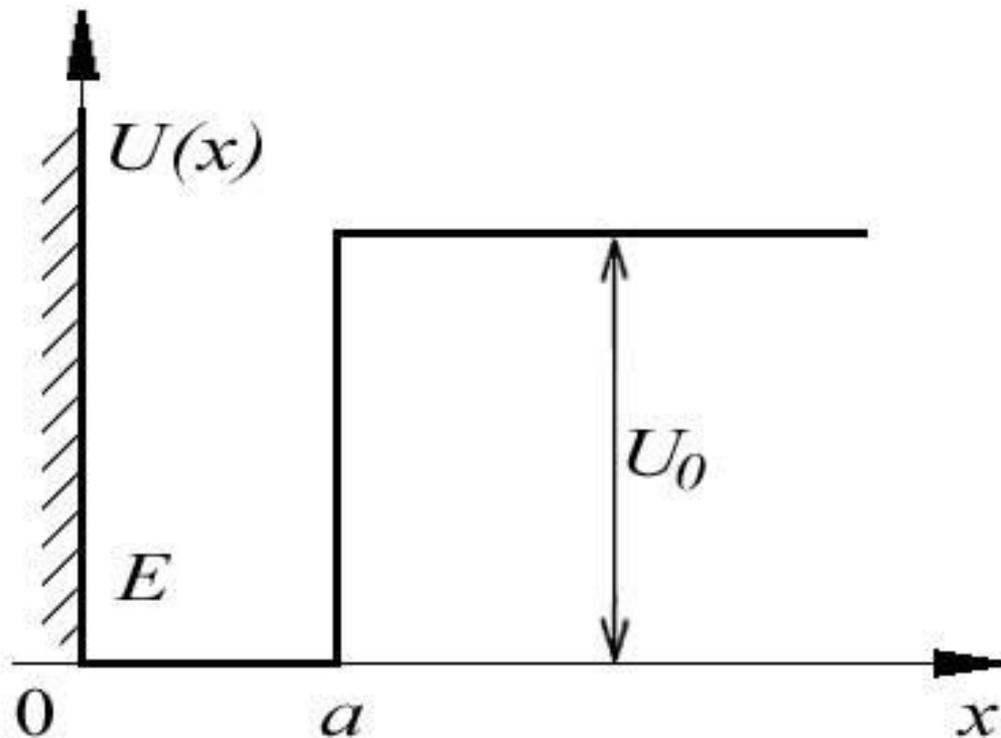


# Движения частицы в яме конечной глубины

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0 \\ 0, & 0 < x < a \\ U_0, & x > a \end{cases}$$

$$\frac{d^2\Psi_1(x)}{dx^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2} E\Psi_1(x) = 0$$

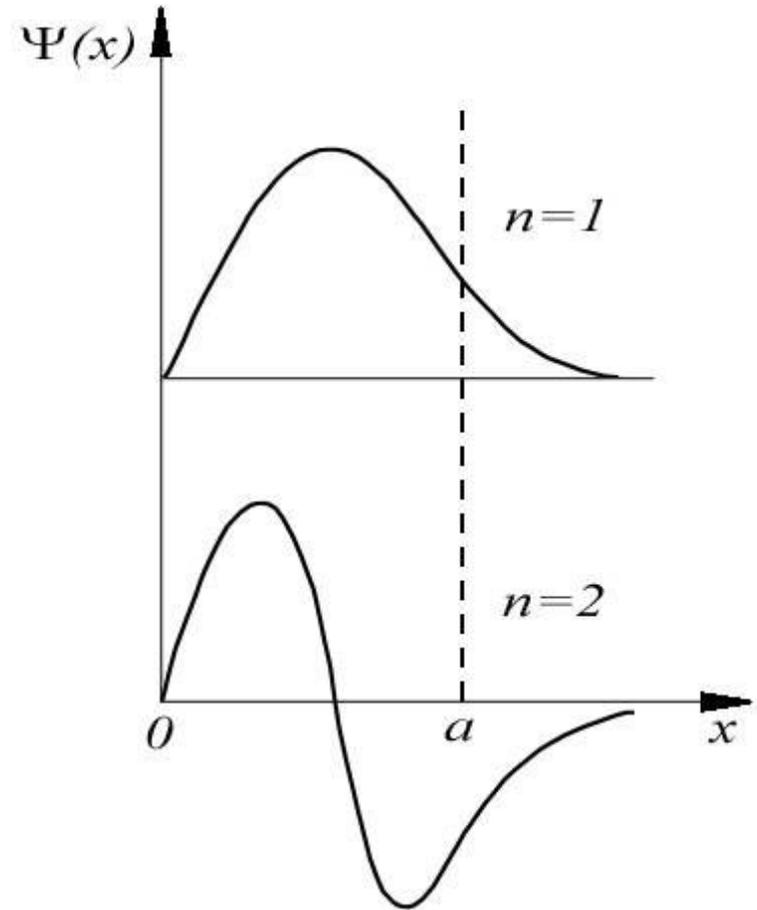
$$\frac{d^2\Psi_2(x)}{dx^2} - \frac{2m_0}{\hbar^2} (U_0 - E)\Psi_2(x) = 0$$



# Движения частицы в яме конечной глубины

$$\Psi_1(x) = A \cdot \sin k_1 x$$

$$\Psi_2(x) = C e^{-k_2 x}$$



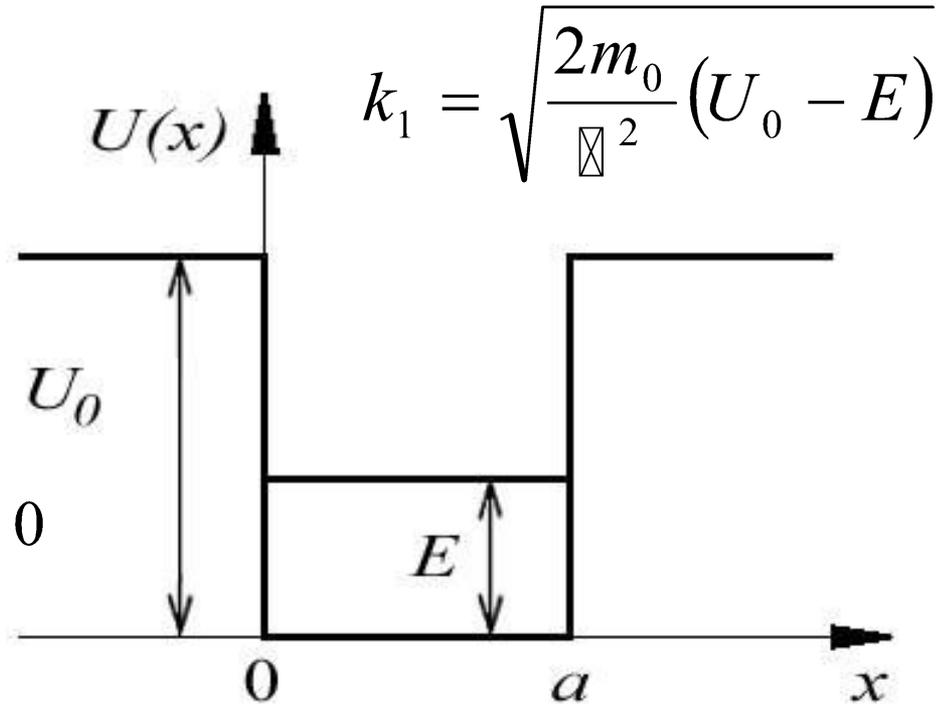
# Потенциальная прямоугольная яма конечной глубины

$$U(x) = \begin{cases} U_0, & x < 0 \\ 0, & 0 < x < a \\ U_0, & x > a \end{cases}$$

$$\frac{d^2 \Psi_{1,3}(x)}{dx^2} - \frac{2m_0}{\hbar^2} (U_0 - E) \Psi_{1,3}(x) = 0$$

$$\frac{d^2 \Psi_{1,3}(x)}{dx^2} + k_1^2 \Psi_{1,3}(x) = 0$$

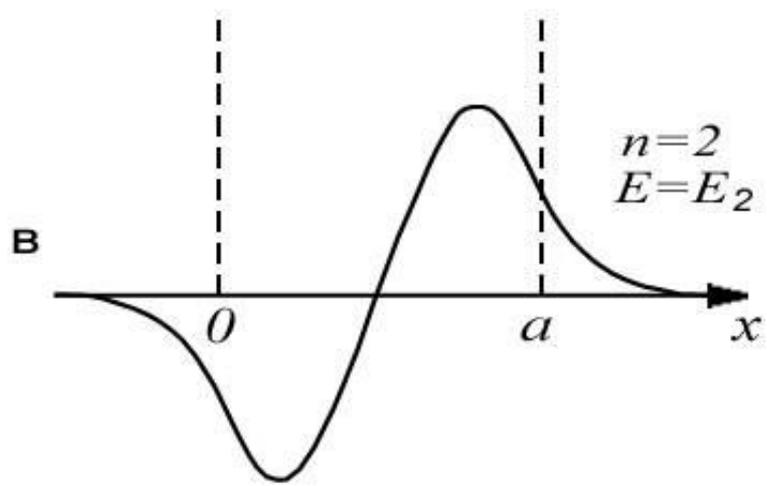
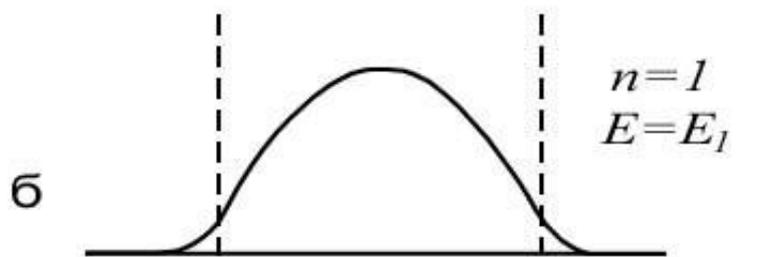
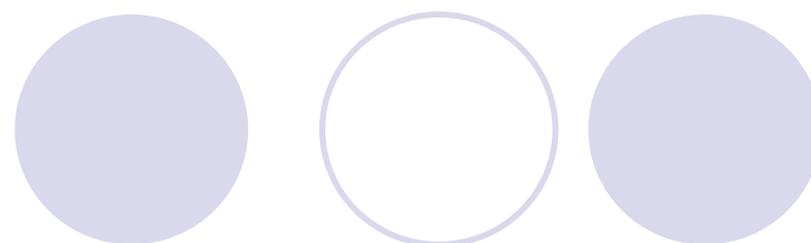
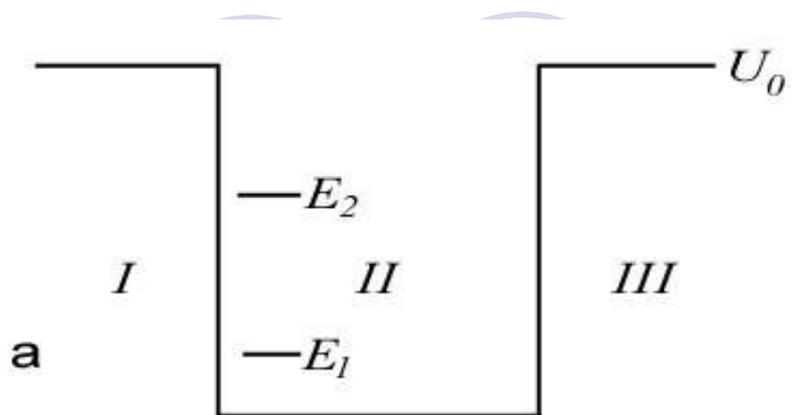
$$\frac{d^2 \Psi_2(x)}{dx^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2} E \Psi_2(x) = 0$$



$$\Psi_1(x) = A_1 \cdot \exp(k_1 x), x < 0;$$

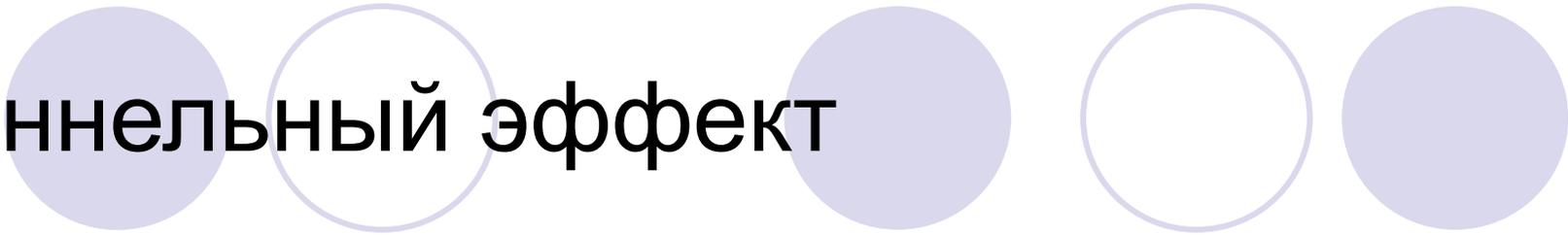
$$\Psi_2(x) = C \cdot \sin(k_2 x + \alpha), 0 < x < a;$$

$$\Psi_3(x) = B_3 \exp(k_1 x), x > a.$$



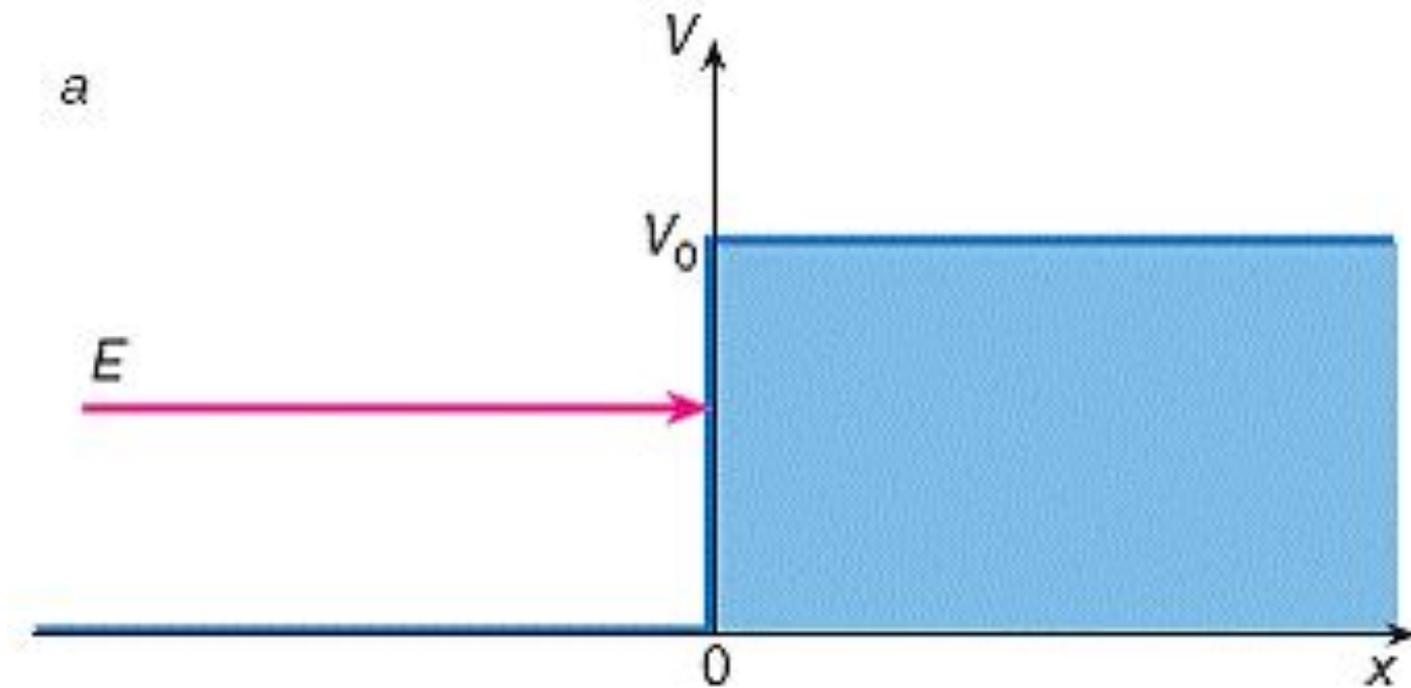
**Потенциальная  
прямоугольная яма  
конечной глубины**

# Туннельный эффект



- Как было показано, решение уравнения Шредингера для свободной частицы ( $U=0$ ) дает одинаковую плотность вероятности обнаружения частицы в любой точке пространства.
- Каково поведение частицы, встречающей на своем пути потенциальный барьер?

# Встреча частицы с потенциальным барьером



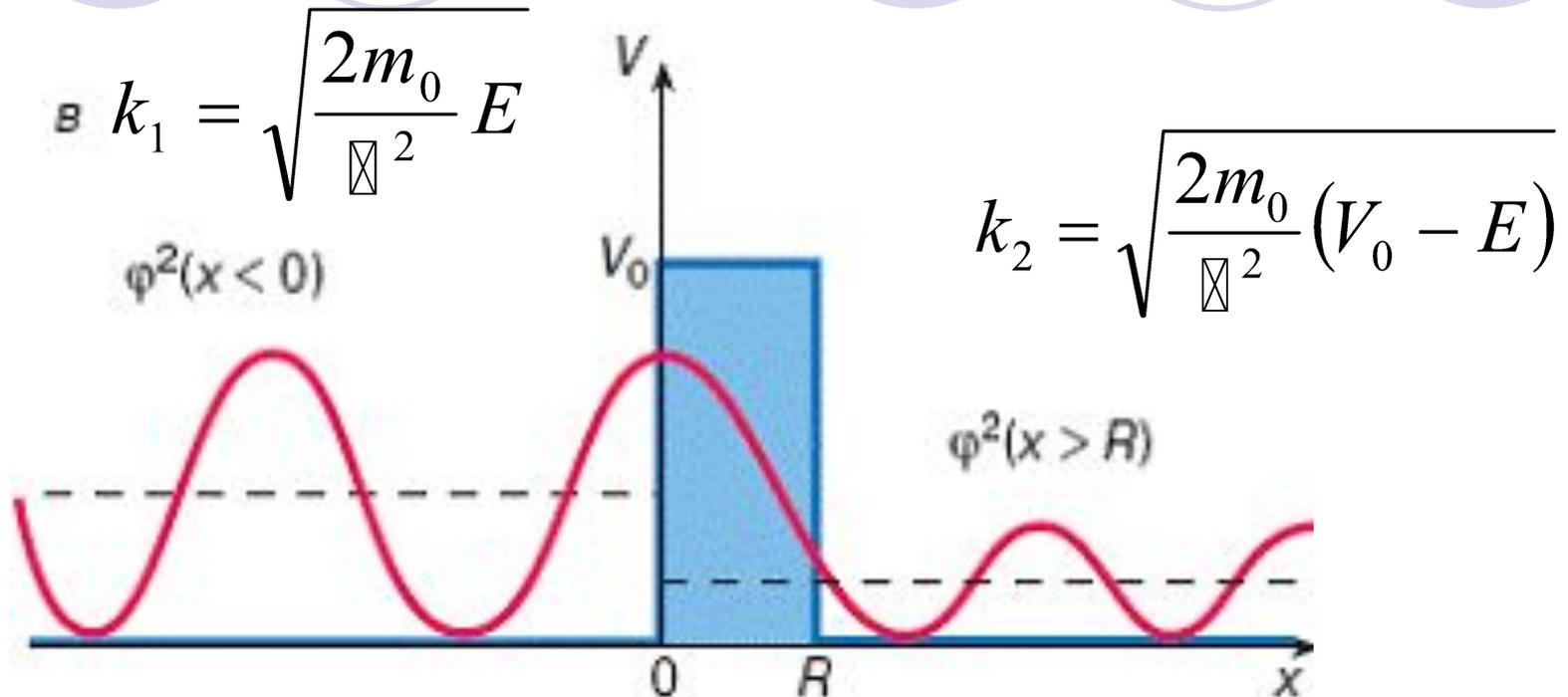
# Встреча частицы с потенциальным барьером

- В рамках классической механики априорно ясно, что тело имеющее полную энергию  $E$  не может преодолеть потенциал  $V_0$ , при условии  $V_0 > E$ . При падении тела на такой барьер оно может лишь полностью отразиться от него независимо от его формы и ширины. Это согласуется с законом сохранения энергии. Если энергия частицы больше высоты потенциального барьера, то частица обязательно проходит над ним.

# Встреча частицы с потенциальным барьером

- Туннельный эффект является принципиально квантово-механическим эффектом, не имеющим аналогов в классической физике. Рассмотрим случай одномерного прямоугольного барьера шириной  $R$

# Преодоление потенциального барьера шириной $R$



$$\Psi_1(x) = A_1 \cdot \exp(ik_1x) + B_1 \cdot \exp(-ik_1x), x < 0$$

$$\Psi_2(x) = A_2 \cdot \exp(ik_2x) + B_2 \cdot \exp(-ik_2x), 0 < x < R$$

$$\Psi_3(x) = A_3 \cdot \exp(ik_1x) + B_3 \cdot \exp(-ik_1x) = A_3 \cdot \exp(ik_1x), x > R$$

# Преодоление потенциального барьера шириной $R$

- Отношение квадратов модулей амплитуд отраженной и падающей волн определяет коэффициент отражения частицы от потенциального барьера:

$$r = \frac{I_{\text{от}}}{I_{\text{пад}}} = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2} = \left( \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2$$

# Коэффициент прохождения $D$

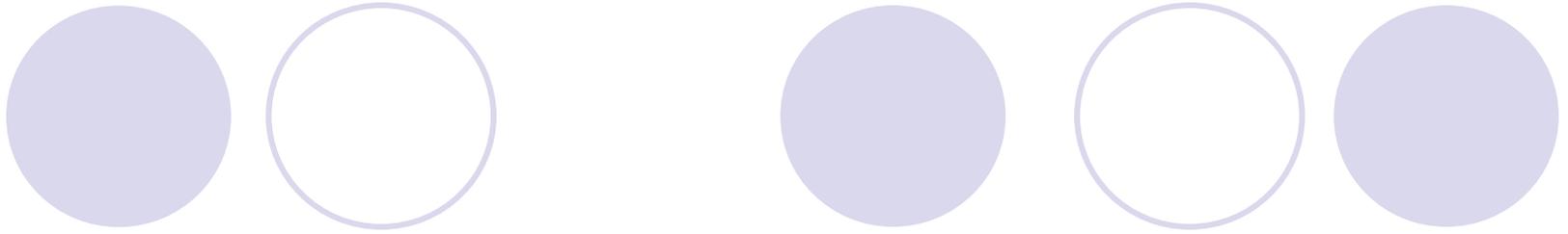
- (коэффициент прозрачности), определяющий часть потока частиц, прошедшего сквозь барьер, связан с коэффициентом отражения:

$$D = 1 - r$$

# Встреча частицы с потенциальным барьером

- Рассмотрение случая высокого потенциального барьера ( $E < V_0$ ) проводится аналогично, но теперь  $k_2$  является мнимой величиной:

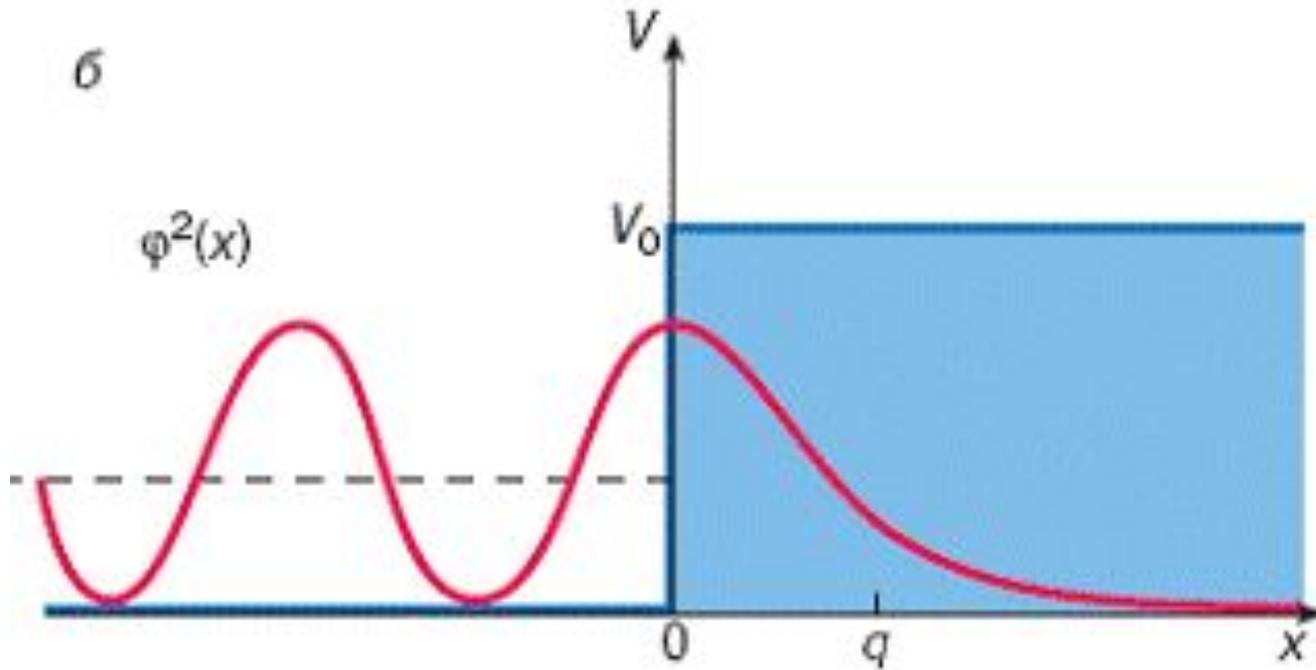
$$k_2 = \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2} (E - V_0)} = ik$$

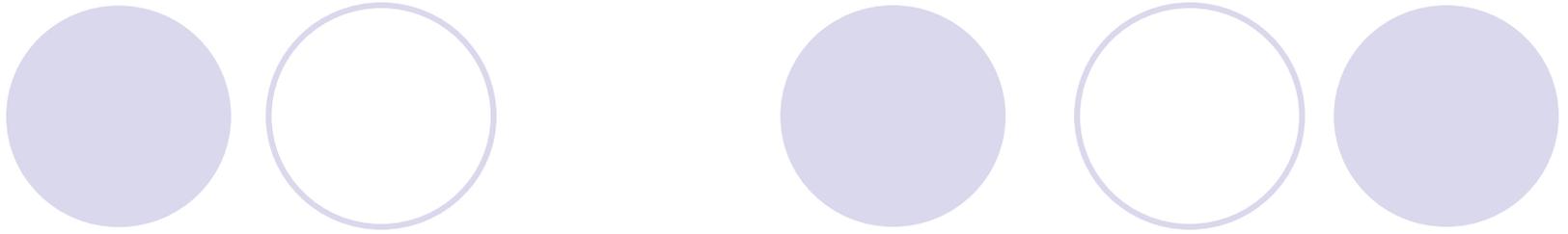


- Полагая  $V_2=0$  (отражением от второй границы барьера можно пренебречь при условии достаточно высокого и широкого потенциального барьера), получаем выражения для пси-функции и коэффициента прозрачности:

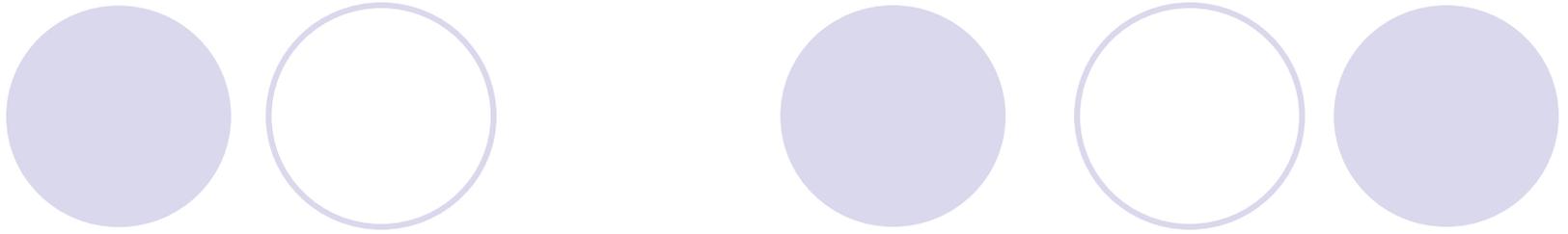
$$\Psi_2(x) = A_2 \cdot \exp(-kx)$$

# Преодоление потенциального барьера произвольной ширины



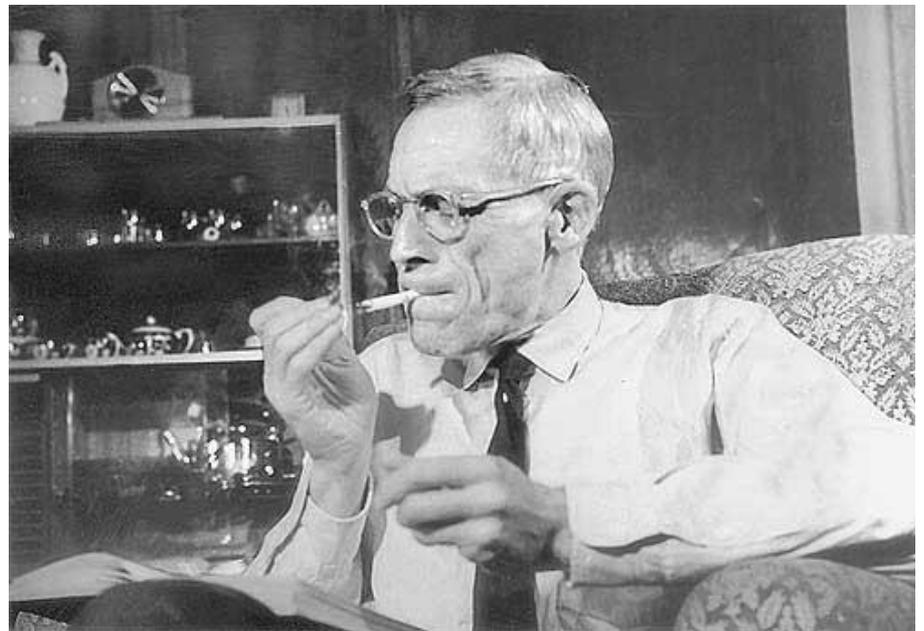


- Можно показать, что для высокого потенциального барьера любой формы коэффициент прозрачности, то есть имеется вероятность проникновения частицы сквозь такой барьер. Частица как бы просачивается («туннелирует») через область потенциального барьера, не изменяя при этом свою энергию. Это явление называется **туннельным эффектом**.



- Вероятность туннелирования уменьшается с ростом ширины барьера, его высоты (точнее, разности  $(V_0 - E)$ ) и с увеличением массы частицы. Например, если электрон ( $m_0 = 9,1 \cdot 10^{-31}$  кг) с энергией  $E = 1$  эВ может преодолеть прямоугольный потенциальный барьер высотой  $= 2$  эВ и шириной  $R = 10^{-8}$  см (размер атома) и при этом коэффициент прозрачности барьера  $0,78$ , то уже для протона ( $m_p = 1,67 \cdot 10^{-27}$  кг) при тех же условиях коэффициент прозрачности барьера  $3,6 \cdot 10^{-19}$ .

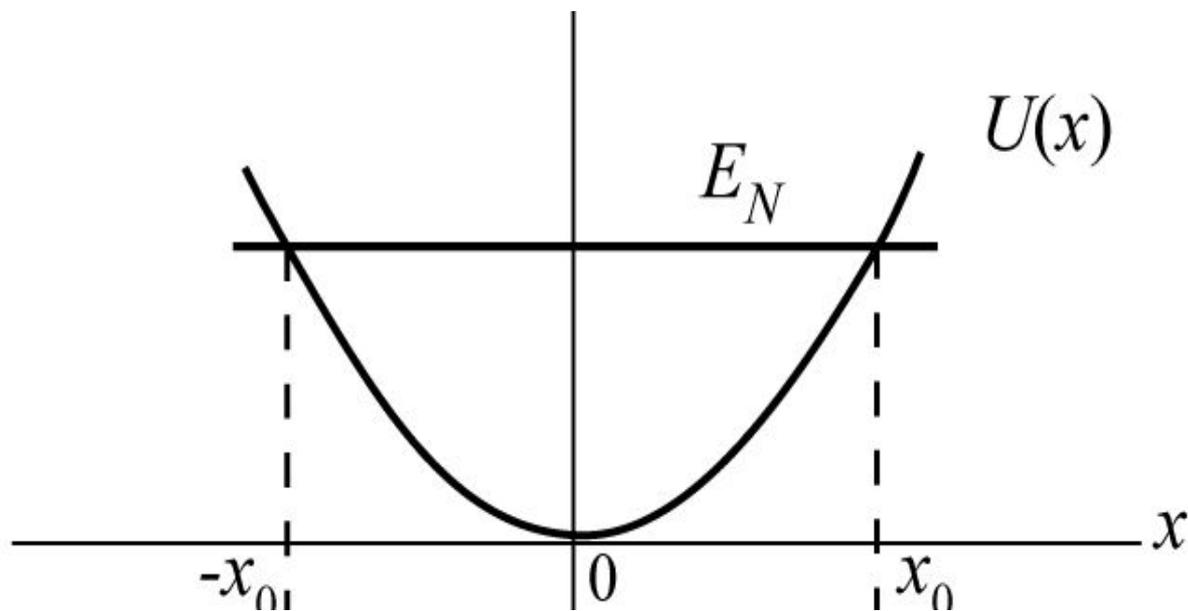
- Основы теории туннельных переходов заложены работами советских ученых Л.И. Мандельштама и М.А. Леонтовича в 1928 г.

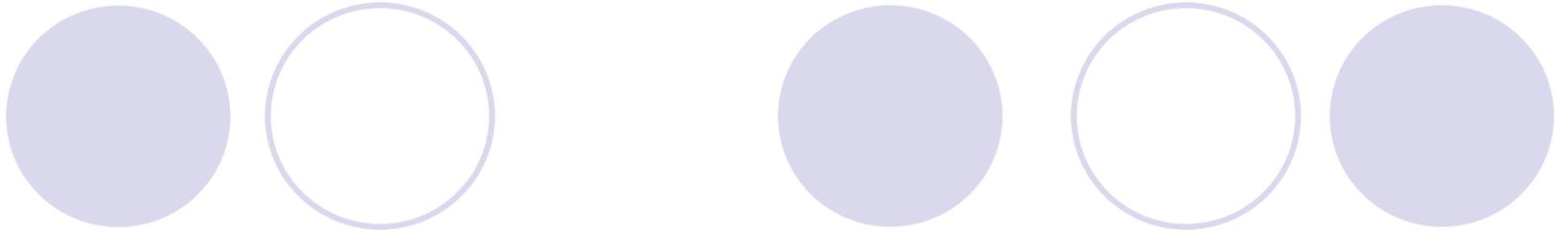


# Квантовый осциллятор

- Известно, что гармонический осциллятор, то есть система, совершающая гармонические колебания с круговой частотой  $\omega = \sqrt{k/m}$ , вызываемые квазиупругой силой  $F = -kx$
- имеет потенциальную энергию  $U = \frac{kx^2}{2} = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$  где  $k$  – коэффициент пропорциональности (в случае упругих сил – коэффициент упругости),  $m$  – масса этой системы.

- Движение частицы при наличии квазиупругих сил рассматривается в квантовой механике как нахождение частицы в параболической яме

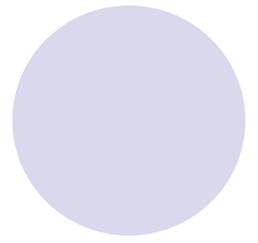
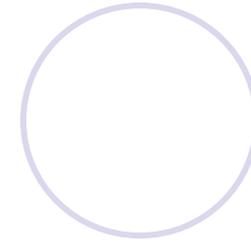
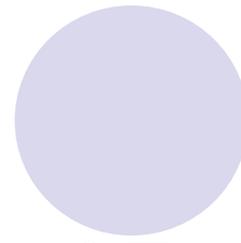
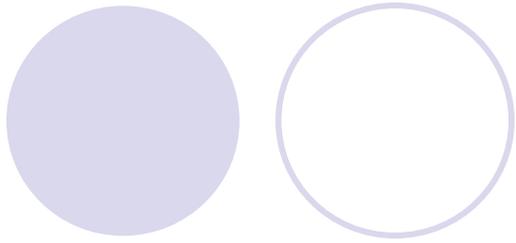




- Гамильтониан для потенциальной
- энергии  $U = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$  примет вид:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{d^2}{dx^2} \right) + \frac{m\omega^2 x^2}{2}$$

$$\frac{d^2 \Psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E - \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right) \Psi(x) = 0$$



- Вводя величины

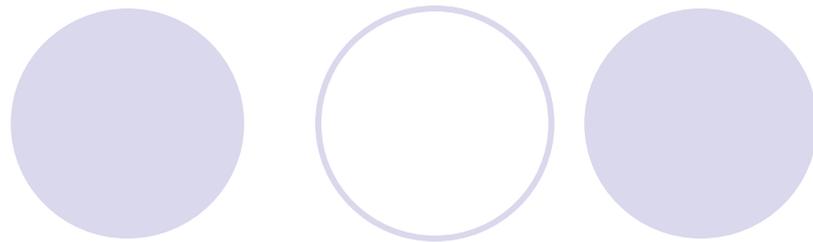
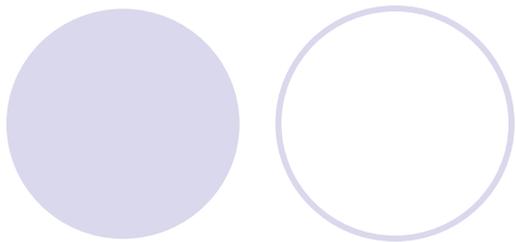
$$\eta = \frac{2E}{\hbar \omega_0}$$

$$\xi = \frac{x}{x_0}$$

$$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m_0 \omega_0}}$$

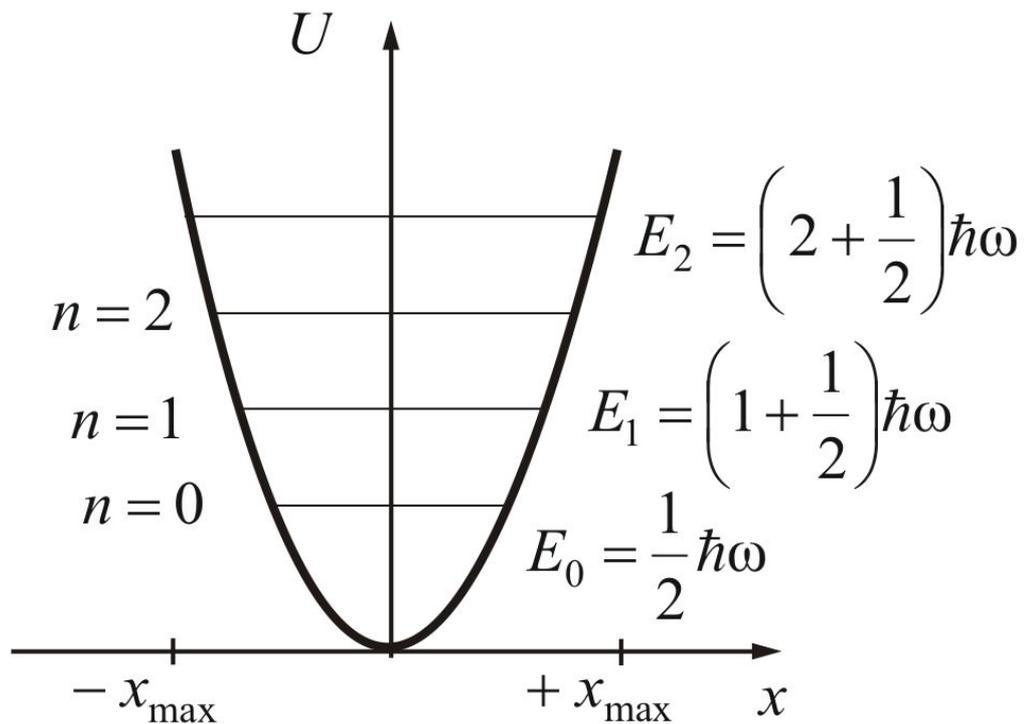
$$\frac{d^2 \Psi(x)}{d\xi^2} + (\eta - \xi^2) \Psi(x) = 0$$

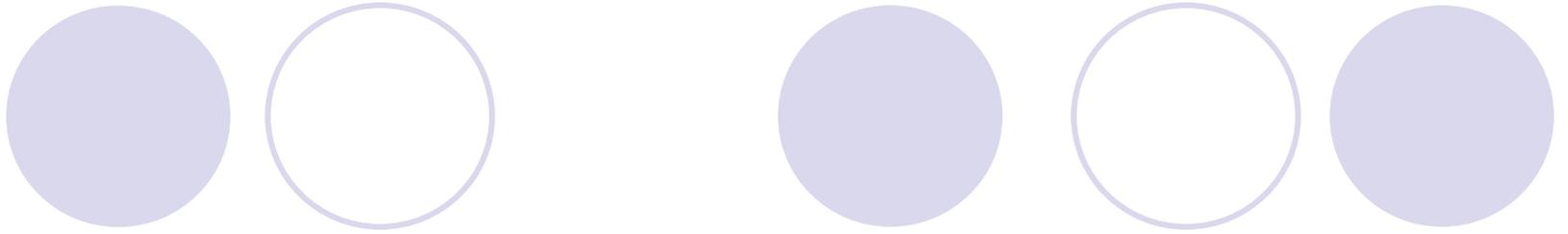
- 
- $\eta = 2n + 1$  где  $n=0, 1, 2, 3, \dots$



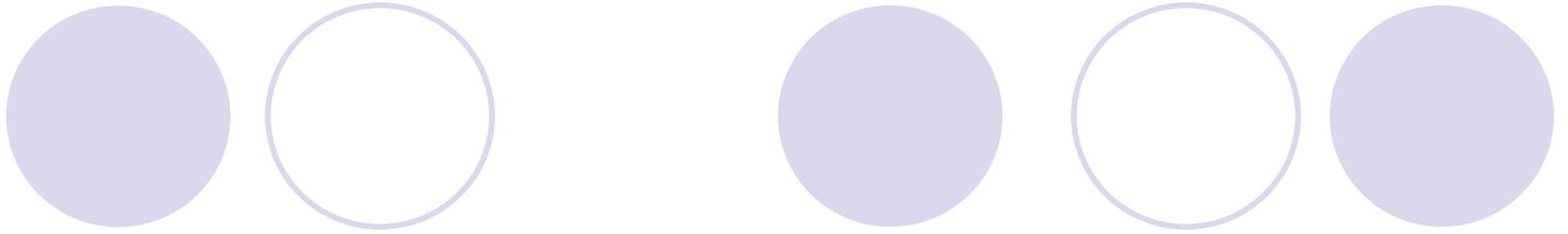
$$E_n = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega$$

$$E_{\min} = E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega$$





- Отметим, что уровни гармонического квантового осциллятора, в отличие от случая прямоугольной потенциальной ямы, расположены на равных расстояниях друг от друга, причем, на основании подсчета вероятности разных переходов оказывается, что возможны переходы системы только в соседние энергетические состояния (выполняется правило отбора:  $\Delta n = \pm 1$ ) с испусканием или поглощением кванта энергии  $\hbar\omega$



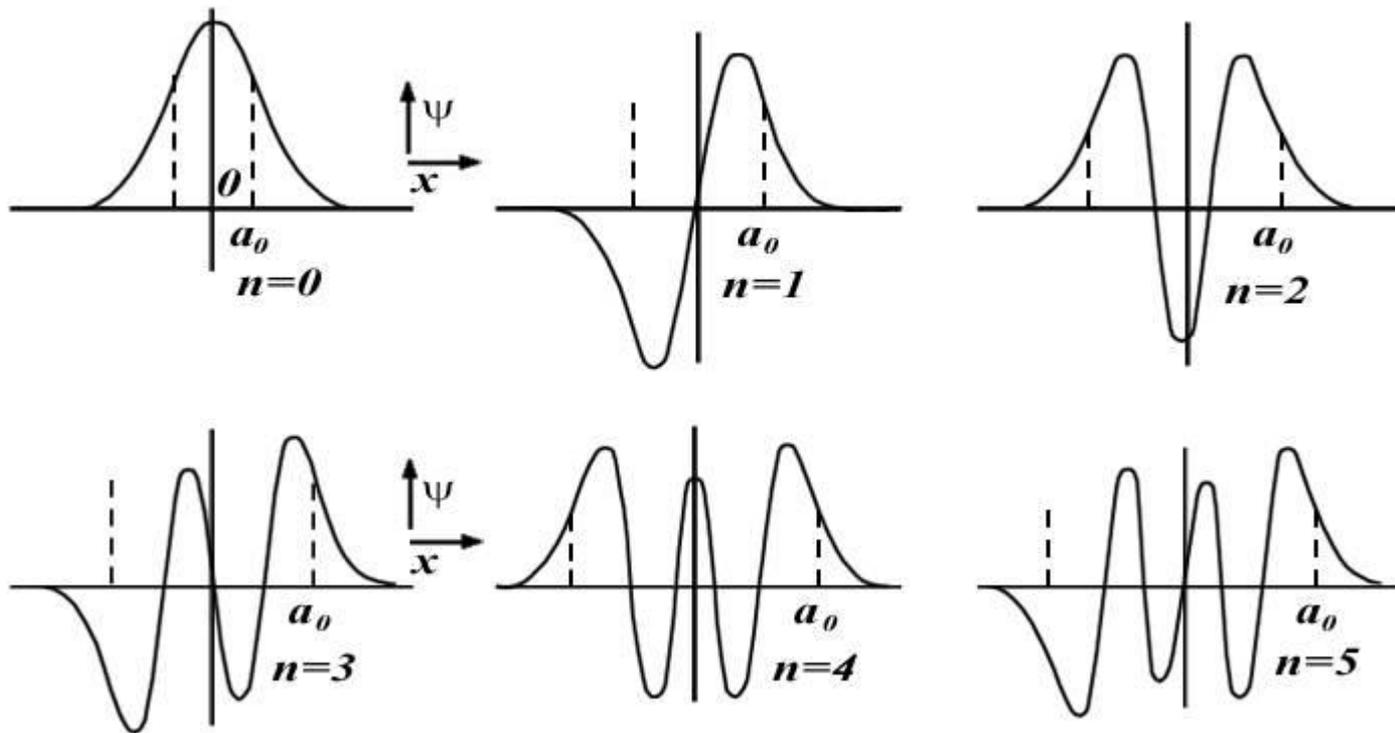
- Приведем вид волновых функций для первых трех энергетических уровней гармонического осциллятора:

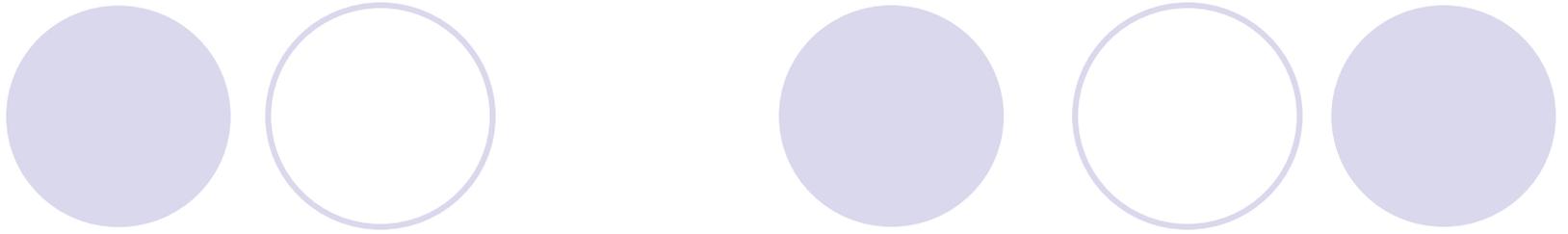
$$n=0, \quad \Psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{x_0 \sqrt{\pi}}} \cdot \exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right)$$

$$n=1, \quad \Psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2x_0 \sqrt{\pi}}} \cdot \frac{2x}{x_0} \exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right)$$

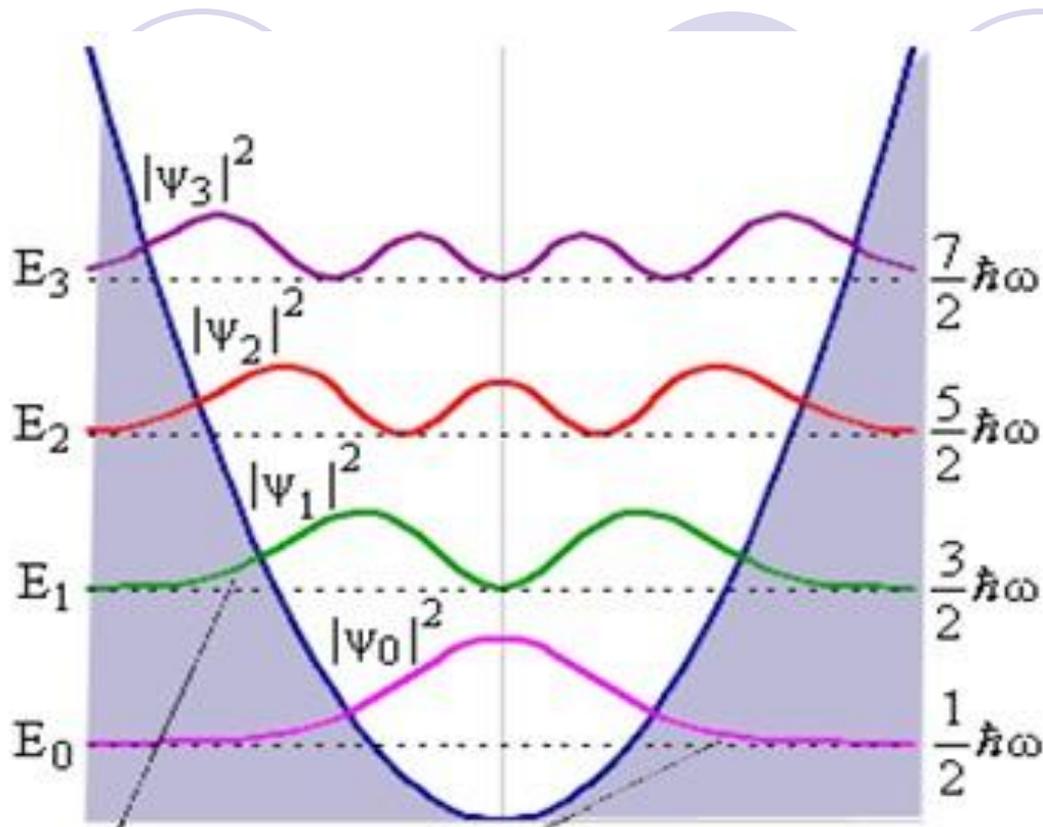
$$n=2, \quad \Psi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{8x_0 \sqrt{\pi}}} \cdot \left(\frac{4x^2}{x_0^2} - 2\right) \exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right)$$

# Волновые функции гармонического осциллятора



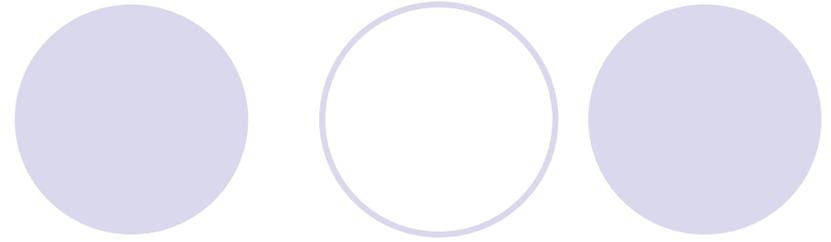
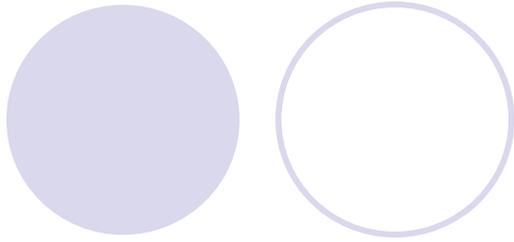


- Отметим, что вне классической области  $[-a_0, a_0]$
- волновые функции отличны от нуля, что свидетельствует о том, что квантовый гармонический осциллятор с определенной вероятностью может находиться вне пределов параболической потенциальной ямы.



Область недоступная для  
классической частицы

**Волновые функции в координатном  
представлении первых восьми  
состояний**



**Вольфганг Паули**

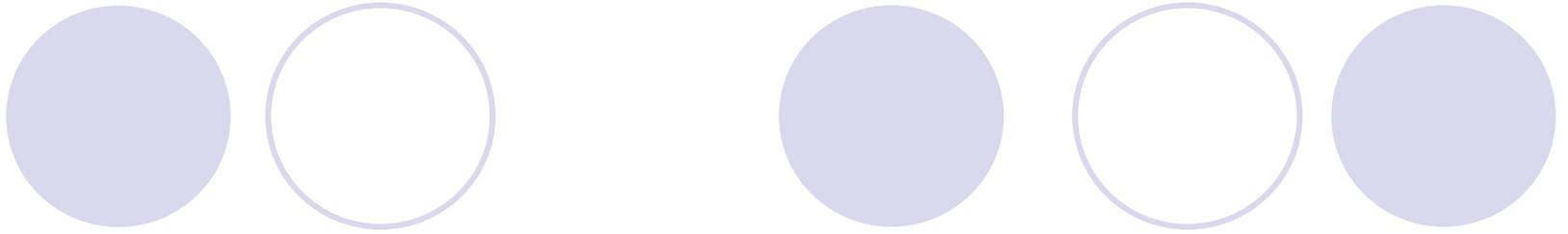
Сколько электронов может находиться на одной орбите? Вольфганг Паули в 1925 г. сформулировал **принцип запрета**: на любой атомной орбите может находиться не более двух электронов. Если бы этого не наблюдалось, все электроны в сложных атомах перешли бы на самый нижний энергетический уровень.

В 1925 г. **Вольфганг Паули** опубликовал свою работу, содержащую формулировку принципа запрета, носящего его имя: в данном квантовом состоянии может находиться только один электрон.



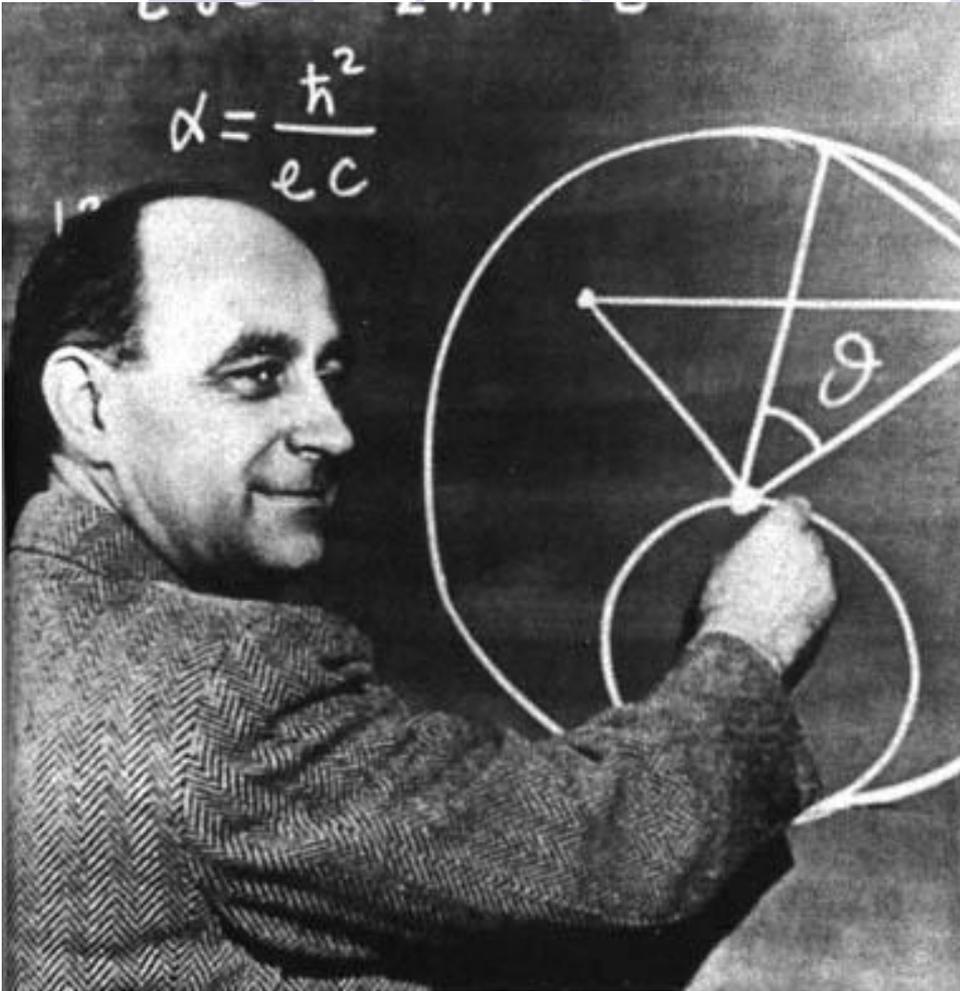
Паули указал, что для характеристики состояния электрона необходимо четыре квантовых числа: главное квантовое число  $n$ , азимутальное квантовое число  $l$  и два магнитных числа  $m$  и  $s$ .

Принцип Паули. В атоме не может быть двух электронов, у которых значения всех квантовых чисел ( $n$ ,  $l$ ,  $m$ ,  $s$ ) были бы одинаковы, т.е. на каждой орбитали может находиться не более двух электронов (с противоположными спинами).



В 1940 г. тот же Паули выдвинул теорему, согласно которой для частиц с полуцелым спином (*фермионов*) выполняется принцип запрета (на одной орбитали находится не более  $2s+1$  частиц).

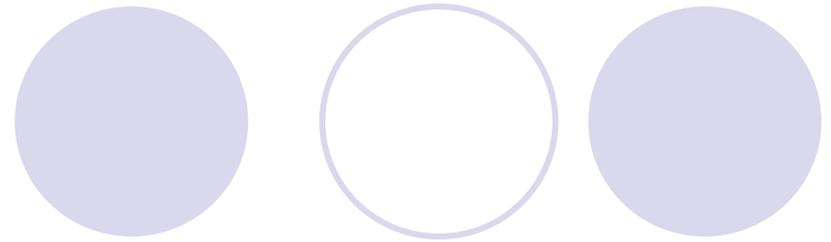
У фотона, глюона (осуществляет обмен между кварками)  $s = 1$  – целое число, *в одном состоянии может находиться любое число частиц.*



Свое название –  
**фермионы**,  
частицы с  
полуцелым спином  
(электроны, дырки)  
получили по имени  
итальянского  
физика Энрико  
Ферми.

**Энри́ко Фёрми** ([итал. \*Enrico\*](#)

*Fermi*; [29.09](#); 29.09.[1901](#); 29.09.1901, [Рим](#); 29.09.1901, Рим, [Италия](#); 29.09.  
.1901, Рим, Италия — [28.11.](#); 29.09.1901, Рим, Италия — 28.11.[1954](#); 29.0  
9.1901, Рим, Италия — 28.11.1954, [Чикаго](#); 29.09.1901, Рим, Италия — 28



Частицы с целым спином (включая нуль) – **Бозоны**, по имени индийского ученого Шатьендраната Бозе.

**Сатьендра Нат Бóзе** ([англ.](#) *Satyendra Nath Bose*) или **Шотендронат Бóшу** ([бенг.](#) (бенг. সত্যেন্দ্র নাথ বসু, *ʃoʈːend̪ronaʈʰ boʃu*) (01 (бенг. সত্যেন্দ্র নাথ বসু, *ʃoʈːend̪ronaʈʰ boʃu*) (01.01 (бенг. সত্যেন্দ্র নাথ বসু, *ʃoʈːend̪ronaʈʰ boʃu*) (01.01.1894 (бенг. সত্যেন্দ্র নাথ বসু, *ʃoʈːend̪ronaʈʰ boʃu*))

## Структура сложных атомов

**Фермионы** – микрочастицы (электроны, протоны, нейтроны,...) с полуцелым спином.

**Бозоны** – микрочастицы (фотоны, мезоны, ...) с целым спином.

**Принцип Паули** (Вольфганг Паули, 1925 г.): два тождественных фермиона не могут одновременно находиться в одном состоянии.

Заполнение электронных оболочек многоэлектронных атомов основано на двух принципах:

1) **Принцип минимальности энергии**: каждый электрон занимает как можно более низкое энергетическое состояние.

2) **Принцип Паули**: два электрона в одном и том же атоме должны различаться по крайней мере одним квантовым числом.

**Следствие**: максимальное число электронов с определенным значением главного квантового числа равно

$$N = \sum_{l=0}^{l=n-1} 2(2l+1) \quad . \quad (14.22)$$