27.5. Определите потенциал ионизации атома водорода. [13,6 В]

27.6. Основываясь на том, что энергия ионизации атома водорода E_i — 13,6 эВ, определите второй потенциал возбуждения этого атома. [12,1 В]

27.7. Основываясь на том, что энергия ионизации атома водорода E_i = 13,6 эВ, определите в электрон-вольтах этюргию фотона, соответствующую самой длинноволновой линии серии Лаймана. [10,2 эВ]

Глава 28
ЭЛЕМЕНТЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

§213. Корпускулярно-волновой дуализм свойств вещества

Французский ученый Луи де Бройль (1892 — 1987), осознавая существующую в природе симметрию и развивая представления о двойственной корпускулярно-волновой природе света, выдвинул в 1923 г. гипотезу об *универсальности корпускулярно-волнового дуализма.* Де Бройль утверждал, что не только фотоны, но и электроны и любые другие частицы материи наряду с корпускулярными обладают также волновыми свойствами.

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

$$E = h\nu, \quad p = \frac{h}{\lambda} \qquad (213.1)$$

Смелость гипотезы де Бройля заключалась именно в том, что соотношение (213.1) постулировалось не только для фотонов, но и для других микрочастиц (в частности, электронов). Таким образом, любой частице, обладающей импульсом, сопоставляют волновой процесс, длина волны которого определяется по ***формуле де Бройля:***

$$\lambda = \frac{h}{p} \qquad (213.2)$$

Вскоре гипотеза де Бройля была подтверждена экспериментально. В 1927 г. американские физики К.Дэвиссон (1881-1958) и Л.Джермер (**1896** — 1971) обнаружили, что пучок электронов, рассеивающийся от естественной дифракционной решетки — кристалла никеля, — дает отчетливую дифракционную картину. Дифракционные максимумы соответствовали формуле Вульфа — Брэггов (182.1), а брэгговская длина волны оказалась в точности равной длине волны, вычисленной по формуле (213.2).

В дальнейшем формула де Бройля была подтверждена опытами П. С. Тартаковского и Г. Томсона, наблюдавших дифракционную картину при прохождении пучка быстрых электронов (энергия $\approx$50 кэВ) через металлическую фольгу (толщиной $\approx$1 мкм).

Так как дифракционная картина исследовалась для потока электронов, то необходимо было доказать, что волновые свойства присущи не только потоку большой совокупности электронов, но и каждому электрону в отдельности.

Это удалось экспериментально подтвердить в 1948 г. российскому физику В. А. Фабриканту (1907 - 1991). Он показал, что даже в случае столь слабого электронного пучка, когда каждый электрон проходит через прибор независимо от других (промежуток времени между двумя электронами в 10^4 раз больше времени прохождения электроном прибора), возникающая при длительной экспозиции дифракционная картина не отличается от дифракционных картин, получаемых при короткой экспозиции для потоков электронов, в десятки миллионов раз более интенсивных. Следовательно, волновые свойства частиц не являются свойством их коллектива, а присущи каждой частице в отдельности.

Впоследствии дифракционные явления обнаружили также для нейтронов, протонов, атомных и молекулярных пучков. Это окончательно послужило доказательством наличия волновых свойств микрочастиц и позволило описывать движение микрочастиц в виде волнового процесса, характеризующегося определенной длиной волны, рассчитываемой по формуле де Бройля (213.2). Открытие волновых свойств микрочастиц привело к появлению и развитию новых методов исследования структуры веществ, таких, как электронография и нейтронография (см. § 182), а также к возникновению новой отрасли науки — электронной оптики (см. § 169).

Экспериментальное доказательство наличия волновых свойств микрочастиц привело к выводу, что перед нами универсальное явление — общее свойство материи. Но тогда волновые свойства должны быть присущи и макроскопическим телам. Почему же они не обнаружены экспериментально? Например, частице массой 1 г, движущейся со скоростью 1 м/с, соответствует волна де Бройля с $X = 6{,}62 \cdot 10^{-31}$ м. Такая длина волны лежит за пределами доступной наблюдению области (периодических структур с периодом $d \approx 10^{-31}$ м не существует). Поэтому считается, что макроскопические тела проявляют только одну сторону своих свойств — корпускулярную и не проявляют волновую.

Представление о двойственной корпускулярно-волновой природе частиц вещества углубляется еще тем, что на частицы вещества переносится связь между полной энергией частицы и частотой:

$$\varepsilon = h\nu. \qquad (213.3)$$

Это свидетельствует о том, что соотношение между энергией и частотой в формуле (213.3) имеет характер *универсального соотношения,* справедливого как для фотонов, так и для любых других микрочастиц. Справедливость же соотношения (213.3) вытекает из согласия с опытом тех теоретических результатов, которые получены с его помощью в квантовой механике, атомной и ядерной физике.

Подтвержденная экспериментально гипотеза де Бройля о корпускулярно-волновом дуализме свойств вещества коренным образом изменила представления о свойствах микрообъектов. Всем микрообъектам присущи как корпускулярные, так и волновые свойства; в то же время любую из микрочастиц нельзя считать ни частицей, ни волной в классическом понимании. Современная трактовка корпускулярно-волнового дуализма может быть выражена словами академика В. А. Фока (1898 — 1974): «Можно сказать, что для атомного объекта существует потенциальная возможность проявлять себя, в зависимости от внешних условий, либо как вол-

на, либо как частица, либо промежуточным образом. Именно в этой *потенциальной возможности* различных проявлений свойств, присущих микрообъекту, и состоит дуализм «волна — частица». Всякое иное, более буквальное, понимание этого дуализма в виде какой-нибудь модели неправильно.» (в сб.: Философские вопросы современной физики. — М.: Изд-во АН СССР, 1959).

§ 214. Некоторые свойства волн де Бройля

Рассмотрим свободно движущуюся со скоростью v частицу массой m. Вычислим для нее фазовую и групповую скорости волн де Бройля. Фазовая скорость, согласно (154.8),

$$v_{\text{фаз}} = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar\omega}{\hbar k} = \frac{E}{p} = \frac{mc^2}{mv} = \frac{c^2}{v} \quad (214.1)$$

($E = \hbar\omega$ и $p = \hbar k$, где k — волновое число). Так как $c > v$, то фазовая скорость волн де Бройля $v_{\text{фаз}} > c$ (это возможно, так как $v_{\text{фаз}}$ не характеризует ни скорости «сигнала», ни скорости перемещения энергии).

Групповая скорость, согласно (155.1),

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

Для свободной частицы $E = \sqrt{m^2c^4 + p^2c^2}$ [см. (40.6)] и

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

[учли выражения (39.3) и (40.3)]. Таким образом, групповая скорость волн де Бройля равна скорости частицы.

Групповая скорость фотона $u = \frac{pc^2}{E} = \frac{mcc^2}{mc^2} = c$, т.е. равна скорости самого фотона.

Волны де Бройля испытывают дисперсию (см. § 154). Действительно, подставив в выражение (214.1) $v_{\text{фаз}} =$ формулу $E = \sqrt{m^2c^4 + p^2c^2}$, увидим, что скорость волн де Бройля зависит от длины волны. Это обстоятельство сыграло в свое время большую роль в развитии положений квантовой механики.

После установления корпускулярно-волнового дуализма делались попытки связать корпускулярные свойства частиц с волновыми и рассматривать частицы как «узкие» волновые пакеты (см. § 155), «составленные» из волн де Бройля. Это позволяло как бы отойти от двойственности свойств частиц. Такая гипотеза соответствовала локализации частицы в данный момент времени в определенной ограниченной области пространства. Аргументом в пользу этой гипотезы являлось и то, что скорость распространения центра пакета (групповая скорость) оказалась, как показано выше, равной скорости частицы. Однако подобное представление частицы в виде волнового пакета (группы волн де Бройля) оказалось несостоятельным из-за сильной дисперсии волн де Бройля, приводящей к «быстрому расплыванию» (примерно 10^{-26} с!) волнового пакета или даже разделению его на несколько пакетов.

§ 215. Соотношение неопределенностей

Согласно двойственной корпускулярно-волновой природе частиц вещества, для описании микрочастиц используются то волновые, то корпуску-

лярные представления. Поэтому приписывать им все свойства частиц и все свойства волн нельзя. Естественно, что необходимо внести некоторые ограничения в применении к объектам микромира понятий классической механики.

В классической механике всякая частица движется по определенной траектории, так что в любой момент времени точно фиксированы ее координата и импульс. Микрочастицы из-за наличия у них волновых свойств существенно отличаются от классических частиц.

Одно из основных различий заключается в том, что нельзя говорить о движении микрочастицы по определенной траектории и неправомерно говорить об одновременных точных значениях ее координаты и импульса. Это следует из корпускулярно-волнового дуализма. Так, понятие «длина волны в данной точке» лишено физического смысла, а поскольку импульс выражается через длину волны [см. (213.1)], то отсюда следует, что микрочастица с определенным импульсом имеет полностью неопределенную координату. И наоборот, если микрочастица находится в состоянии с точным значением координаты, то ее импульс является полностью неопределенным.

В. Гейзенберг, учитывая волновые свойства микрочастиц и связанные с волновыми свойствами ограничения в их поведении, пришел в 1927 г. к выводу, что объект микромира невозможно одновременно с любой наперед заданной точностью характеризовать и координатой, и импульсом. Согласно ***соотношению неопределенностей Гейзенберга***, микрочастица (микрообъект) не может иметь одновременно и определенную координату (x, y, z), и определенную соответствующую проекцию импульса (p_x, p_y, p_z), причем неопределенности этих величин удовлетворяют условиям

$$\Delta x \Delta p_x \geqslant h; \Delta y \Delta p_y \geqslant h; \Delta z \Delta p_z \geqslant h, \quad (215.1)$$

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

Из соотношения неопределенностей (215.1) следует, что, например, если микрочастица находится в состоянии с точным значением координаты ($\Delta x = 0$), то в этом состоянии соответствующая проекция ее импульса оказывается совершенно неопределенной ($\Delta p_x \to$ оо), и наоборот. Таким образом, *для микрочастицы не существует состояний, в которых ее координаты и импульс имели бы одновременно точные значения.* Отсюда вытекает и фактическая невозможность одновременно с любой наперед заданной точностью измерить координату и импульс микрообъекта.

Поясним, что соотношение неопределенностей действительно вытекает из волновых свойств микрочастиц. Пусть поток электронов проходит через узкую щель шириной Δx, расположенную перпендикулярно направлению их движения (рис. 298). Так как электроны обладают волновыми свойствами, то при их прохождении через щель, размер которой сравним с длиной волны де Бройля X электрона, наблюдается дифракция. Дифракционная картина,

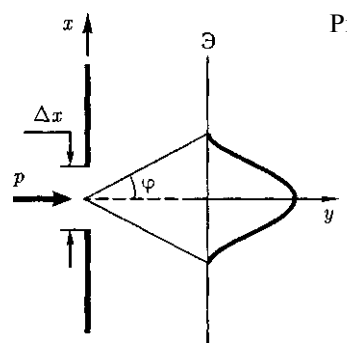


Рис. 298

наблюдаемая на экране (Э), характеризуется главным максимумом, расположенным симметрично оси *y*, и побочными максимумами по обе стороны от главного (их не рассматриваем, так как основная доля интенсивности приходится на главный максимум).

До прохождения через щель электроны двигались вдоль оси *y*, поэтому составляющая импульса $p_x = 0$, так что $\Delta p_x = 0$, а координата *x* частицы является совершенно неопределенной. В момент прохождения электронов через щель их положение в направлении оси x определяется с точностью до ширины щели, т.е. с точностью Δx. В этот же момент вследствие дифракции электроны отклоняются от первоначального направления и будут двигаться в пределах угла 2φ (φ — угол, соответствующий первому дифракционному минимуму). Следовательно, появляется неопределенность в значении составляющей импульса вдоль оси *x*, которая, как следует из рис. 298 и формулы (213.1), равна

$$\Delta p_x = p \sin\varphi = \frac{h}{\lambda} \sin\varphi. \qquad (215.2)$$

Для простоты ограничимся рассмотрением только тех электронов, которые попадают на экран в пределах главного максимума. Из теории дифракции (см. § 179) известно, что первый минимум соответствует углу ф, удовлетворяющему условию

$$\Delta x \sin\varphi = \lambda, \qquad (215.3)$$

где Δx — ширина щели; X — длина волны де Бройля.

Из формул (215.2) и (215.3) получим

$$\Delta x \Delta p_x = h,$$

где учтено, что для некоторой, хотя и незначительной, части электронов, попадающих за пределы главного максимума, величина $\Delta p_x \geqslant p \sin\varphi$. Следовательно, получаем выражение

$$\Delta x \Delta p_x \geqslant h,$$

т.е. соотношение неопределенностей (215.1).

Невозможность одновременно точно определить координату и соответствующую проекцию импульса не связана с несовершенством методов измерения или измерительных приборов, а является следствием специфики микрообъектов, отражающей особенности их объективных свойств, а именно двойственной корпускулярно-волновой природы.

Соотношение неопределенностей получено при одновременном использовании классических характеристик движения частицы (координаты, импульса) и наличия у нее волновых свойств. Так как в классической механике принимается, что измерение координаты и импульса может быть произведено с любой точностью, то *соотношение неопределенностей является,* таким образом, *квантовым ограничением применимости классической механики к микрообъектам.*

Соотношение неопределенностей, отражая специфику физики микрочастиц, позволяет оценить, например, в какой мере можно применять понятия классической механики к микрочастицам, в частности, с какой степенью точности можно говорить о траекториях микрочастиц. Известно, что движение по траектории характеризуется в любой момент времени определенными значениями координат и скорости. Выразим соотношение неопределенностей (215.1) в виде

$$\Delta x \Delta v_x \geqslant \frac{h}{m}. \qquad (215.4)$$

Из этого выражения следует, что чем больше масса частицы, тем меньше неопределенности ее координаты и скорости и, следовательно, с тем большей точностью можно применять к этой частице понятие траектории. Так, например, уже для пылинки массой 10^{-12} кг и линейными размерами 10^{-6} м, координата которой определена с точностью до 0,01 ее размеров (Δx - 10^{-8} м),

неопределенность скорости, по (215.4),

$$\Delta v_x = \frac{6,63 \cdot 10^{-34}}{10^{-8} \cdot 10^{-12}} \text{ м/с} = 6,63 \cdot 10^{-14} \text{ м/с},$$

т. е. не будет сказываться при всех скоростях, с которыми пылинка может двигаться.

Таким образом, для макроскопических тел их волновые свойства не играют никакой роли; координата и скорость макротел могут быть одновременно измерены достаточно точно. Это означает, что для описания движения макротел с абсолютной достоверностью можно пользоваться законами классической механики.

Предположим, пучок электронов движется вдоль оси x со скоростью $v = 10^8$ м/с, определяемой с точностью до 0,01 % ($\Delta v_x \approx 10^4$ м/с). Какова точность определения координаты электрона? По формуле (215.4),

$$\Delta x = \frac{h}{m\Delta v_x} = \frac{6,63 \cdot 10^{-34}}{9,11 \cdot 10^{-31} \cdot 10^4} = 7,27 \cdot 10^{-6} \text{ м},$$

т.е. положение электрона может быть определено с точностью до тысячных долей миллиметра. Такая точность достаточна, чтобы можно было говорить о движении электронов по определенной траектории, иными словами, описывать их движение законами классической механики.

Применим соотношение неопределенностей к электрону, движущемуся в атоме водорода. Допустим, что неопределенность координаты электрона $\Delta x \approx 10^{-10}$ м (порядка размеров самого атома, т. е. можно считать, что электрон принадлежит данному атому). Тогда, согласно (215.4), $\Delta v_x = \frac{6,63 \cdot 10^{-34}}{9,11 \cdot 10^{-31} \cdot 10^{-10}} = 7,28 \cdot 10^6$ м/с. Используя законы классической физики, можно показать, что при движении электрона вокруг ядра по круговой орбите радиуса $\approx 0,5 \cdot 10^{-10}$ м его скорость $v \approx 2,3 \cdot 10^6$ м/с. Таким образом, неопределенность скорости соизмерима со скоростью. Очевидно, что в данном случае нельзя говорить о движении электрона в атоме по определенной траектории, иными словами, для описания движения электрона в атоме нельзя пользоваться законами классической физики.

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

$$\Delta E \Delta t \geqslant h. \qquad (215.5)$$

Подчеркнем, что AE — неопределенность энергии некоторого состояния системы, At — промежуток времени, в течение которого оно существует. Следовательно, система, имеющая среднее время жизни At, не может быть охарактеризована определенным значением энергии; разброс энергии AE = — возрастает с уменьшением среднего времени жизни.

Из выражения (215.5) следует, что частота излученного фотона также должна иметь неопределенность $\lambda v = \frac{AE}{h}$, т. е. линии спектра должны характеризоваться частотой, равной $\nu \pm \frac{AE}{h}$. Опыт подтверждает, что все спектральные линии размыты; измеряя ширину спектральной линии, можно оценить порядок времени существования атома в возбужденном состоянии.

§ 216. Волновая функция и ее статистический смысл

Экспериментальное подтверждение идеи де Бройля об универсальности корпускулярно-волнового дуализма,

ограниченность применения классической механики к микрообъектам, диктуемая соотношением неопределенностей, а также противоречие целого ряда экспериментов с применяемыми в начале XX в. теориями привели к новому этапу развития квантовой теории — созданию ***квантовой механики,*** описывающей законы движения и взаимодействия микрочастиц с учетом их волновых свойств. Ее создание и развитие охватывает период с 1900 г. (формулировка Планком квантовой гипотезы; см. § 200) до 20-х годов XX в.; оно связано прежде всего с работами австрийского физика Э.Шредингера (1887—1961), немецкого физика В. Гейзенберга и английского физика П.Дирака (1902—1984).

При становлении квантовой механики возникли принципиальные трудности, в частности проблема физической природы волн де Бройля. Для выяснения этой проблемы сравним дифракцию световых волн и микрочастиц. Дифракционная картина, наблюдаемая для световых волн, характеризуется тем, что в результате наложения дифрагирующих волн друг на друга в различных точках пространства происходит усиление или ослабление амплитуды колебаний. Согласно волновым представлениям о природе света, интенсивность дифракционной картины пропорциональна квадрату амплитуды световой волны. По представлениям фотонной теории, интенсивность определяется числом фотонов, попадающих в данную точку дифракционной картины. Следовательно, число фотонов в данной точке дифракционной картины задается квадратом амплитуды световой волны, в то время как для одного фотона квадрат амплитуды определяет вероятность попадания фотона в ту или иную точку.

Дифракционная картина, наблюдаемая для микрочастиц, также характеризуется неодинаковым распределением потоков микрочастиц, рассеянных или отраженных по различным направлениям, — в одних направлениях наблюдается большее число частиц, чем в других.

Наличие максимумов в дифракционной картине с точки зрения волновой теории означает, что эти направления соответствуют наибольшей интенсивности волн де Бройля. С другой стороны, интенсивность волн де Бройля оказывается больше там, где имеется большее число частиц, т.е. интенсивность волн де Бройля в данной точке пространства определяет число частиц, попавших в эту точку. Таким образом, дифракционная картина для микрочастиц является проявлением статистической (вероятностной) закономерности, согласно которой частицы попадают в те места, где интенсивность волн де Бройля наибольшая.

Необходимость *вероятностного подхода к описанию микрочастиц* является важнейшей отличительной особенностью квантовой теории. Можно ли волны де Бройля истолковывать как волны вероятности, т. е. считать, что вероятность обнаружить микрочастицу в различных точках пространства меняется по волновому закону? Такое толкование воли де Бройля уже неверно хотя бы потому, что тогда вероятность обиаружить частицу в некоторых точках пространства может быть отрицательна, что не имеет смысла.

Чтобы устранить эти трудности, немецкий физик М.Борн (1882-1970) в 1926 г. предположил, что по волновому закону меняется не сама вероятность, а величина, названная ***амплитудой вероятности*** и обозначаемая $\Psi(x, y, z, t)$.Эту величину называют так-

же ***волновой функцией*** (или ***Ψ-функцией).*** Амплитуда вероятности может быть комплексной, и вероятность W пропорциональна квадрату ее модуля:

$$W \sim |\Psi(x, y, z, t)|^2 \qquad (216.1)$$

($|\Psi|^2 = \Psi\Psi^*$, Ф* — функция, комплексно сопряженная с Ф). Таким образом, описание состояния микрообъекта с помощью волновой функции имеет ***статистический, вероятностный характер:*** квадрат модуля волновой функции (квадрат модуля амплитуды волн де Бройля) определяет вероятность нахождения частицы в момент времени t в области с координатами x и $x + dx$, y и $y + dy$, z и $z + dz$.

Итак, в квантовой механике состояние микрочастиц описывается принципиально по-новому — *с помощью волновой функции,* которая является *основным носителем информации* об их корпускулярных и волновых свойствах. Вероятность нахождения частицы в элементе объемом dV равна

$$\mathrm{d}W = |\Psi|^2 \mathrm{d}V. \qquad (216.2)$$

Величина (квадрат модуля Ψ-функции)

$$|\Psi|^2 = \frac{\mathrm{d}W}{\mathrm{d}V}$$

имеет смысл ***плотности вероятности,*** т. е. определяет вероятность нахождения частицы в окрестности точки с координатами x, y, z. Таким образом, физический смысл имеет не сама Ф-функция, а квадрат ее модуля $|\Phi|^2$, которым задается *интенсивность воли де Бройля.*

Вероятность найти частицу в момент времени t в конечном объеме V, согласно теореме сложения вероятностей, равна

$$W = \int_V \mathrm{d}W = \int_V |\Psi|^2 \mathrm{d}V.$$

Так как $|\Psi|^2 \mathrm{d}V$ определяется как вероятность, то необходимо волновую функцию Ф 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***

$$\int_{-\infty} |\Psi|^2 \mathrm{d}V = 1, \qquad (216.3)$$

где данный интеграл вычисляется но всему бесконечному пространству, т. е. по координатам x, y, z от -оо до $+\infty$. Таким образом, условие (216.3) говорит об объективном существовании частицы в пространстве.

Чтобы волновая функция являлась объективной характеристикой состояния микрочастиц, она должна удовлетворять ряду ограничительных условий. Функция Ф, характеризующая вероятность обнаружения действия микрочастицы в элементе объема, должна быть *конечной* (вероятность не может быть больше единицы), *однозначной* (вероятность не может быть неоднозначной величиной) и *непрерывной* (вероятность не может изменяться скачком).

Волновая функция удовлетворяет ***принципу суперпозиции:*** если система может находиться в различных состояниях, описываемых волновыми функциями Ψ_1, Ψ_2, ..., Ψ_n, ..., то она также может находиться в состоянии Ф, описываемом линейной комбинацией этих функций:

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

где C_n (п = 1, 2, ...) — произвольные, вообще говоря, комплексные числа. Сложение *волновых функций* (амплитуд

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

Волновая функция Ф, являясь основной характеристикой состояния микрообъектов, позволяет в квантовой механике вычислять средние значения физических величин, характеризующих данный микрообъект. Например, среднее расстояние (г) электрона от ядра определяют по формуле

$$\langle r \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} r|\Psi|^2 \mathrm{d}V,$$

где интегрирование производится, как и в случае (216.3).

§ 217. Общее уравнение Шредингера. Уравнение Шредингера для стационарных состояний

Из статистического толкования волн де Бройля (см. § 216) и соотношения неопределенностей Гейзенберга (см. § 215) следовало, что уравнением движения в квантовой механике, описывающим движение микрочастиц в различных силовых полях, должно быть уравнение, из которого бы вытекали наблюдаемые на опыте волновые свойства частиц.

Основное уравнение должно быть уравнением относительно волновой функции $\Psi(x, y, z, t)$, так как именно она, или, точнее, величина $|\Phi|^2$, определяет вероятность пребывания частицы в момент времени t в объеме dV, т.е. в области с координатами x и $x + dx$, y и $y+dy$, z и $z + \mathrm{d}z$. Так как искомое уравнение должно учитывать волновые свойства частиц, то оно должно быть ***волновым уравнением,*** подобно уравнению, описывающему электромагнитные волны.

Основное уравнение *нерелятивистской квантовой механики* сформулировано в 1926 г. Э. Шредингером. Уравнение Шредингера, как и все основные уравнения физики (например, уравнения Ньютона в классической механике и уравнения Максвелла для электромагнитного поля), не выводится, а постулируется. Правильность этого уравнения подтверждается согласием с опытом получаемых с его помощью результатов, что, в свою очередь, придает ему характер закона природы. Уравнение Шредингера имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + U(x,y,z,t)\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}, \quad (217.1)$$

г $\hbar = \frac{h}{2\pi}$; m масса частицы; А — 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, $U(x, y, z, t)$ — потенциальная функция частицы в силовом поле, в котором она движется; $\Psi(x, y, z, t)$ — искомая волновая функция частицы.

Уравнение (217.1) справедливо для любой частицы (со спином, равным 0; см. § 225), 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 (см. § 216); 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 $|\Phi|^2$ должна быть интегрируема; это условие в простейших случаях сводится к

условию нормировки вероятностеи (216.3).

Чтобы прийти к уравнению Шредингера, рассмотрим свободно движущуюся частицу, которой, согласно идее де Бройля, сопоставляется плоская волна. Для простоты рассмотрим одномерный случай. Уравнение плоской волны, распространяющейся вдоль оси x, имеет вид (см. § 154) $\xi(x,t) = A\cos(\omega t - kx)$, или в комплексной записи $\xi(x,t) = Ae^{i(\omega t - kx)}$. Следовательно, плоская волна де Бройля имеет вид

$$\Psi = Ae^{-\frac{i}{\hbar}(Et-px)} \qquad (217.2)$$

(учтено, что $\omega = \frac{E}{\hbar}$, $k = \frac{p}{\hbar}$). В квантовой механике показатель экспоненты берут со знаком «—», но поскольку физический смысл имеет только $|\Phi|^2$, то это несущественно. Тогда

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}E\Psi; \quad \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 p^2\Psi = -\frac{1}{\hbar^2}p^2\Psi,$$

откуда

$$E = -\frac{\hbar}{i}\frac{1}{\Psi}\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \frac{1}{\Psi}i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}; \qquad (217.3)$$
$$p^2 = -\frac{1}{\Psi}\hbar^2\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}.$$

Используя взаимосвязь между энергией E и импульсом p ($E = \frac{p^2}{2m}$) и подставляя выражения (217.3), получим дифференциальное уравнение

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t},$$

которое совпадает с уравнением (217.1) для случая $U = 0$ (мы рассматривали свободную частицу).

Если частица движется в силовом поле, характеризуемом потенциальной энергией U, то полная энергия E складывается из кинетической и потенциальной энергий. Проводя аналогичные рассуждения и используя взаимосвязь между E и p (для данного случая $\frac{p^2}{2m} = E - U$), придем к дифференциальному уравнению, совпадающему с (217.1).

Приведенные рассуждения *не должны восприниматься как вывод уравнения Шредингера*. Они лишь поясняют, как можно прийти к этому уравнению. Доказательством правильности уравнения Шредингера является согласие с опытом тех выводов, к которым оно приводит.

Уравнение (217.1) является ***общим уравнением Шредингера***. Его также называют ***уравнением Шредингера, зависящим от времени***. Для многих физических явлений, происходящих в микромире, уравнение (217.1) можно упростить, исключив зависимость Ψ от времени, иными словами, найти уравнение Шредингера для *стационарных состояний — состояний с фиксированными значениями энергии*. Это возможно, если силовое поле, в котором частица движется, стационарно, т. е. функция $U = U(x, y, z)$ не зависит явно от времени и имеет смысл потенциальной энергии.

В данном случае решение уравнения Шредингера может быть представлено в виде произведения двух функций, одна из которых есть функция только координат, другая — только времени, причем зависимость от времени выражается множителем $e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$, так что

$$\Psi(x,y,z,t) = \psi(x,y,z)e^{-\frac{i}{\hbar}Et}, \qquad (217.4)$$

где E — полная энергия частицы, постоянная в случае стационарного поля. Подставляя (217.4) в (217.1), получим

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

откуда после деления на общий множитель $e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$ и соответствующих преобра-

зовании придем к уравнению, определяющему функцию ψ:

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\psi = 0. \quad (217.5)$$

Уравнение (217.5) называется ***уравнением Шредингера для стационарных состояний.*** В это уравнение в качестве параметра входит полная энергия E частицы. В теории дифференциальных уравнений доказывается, что подобные уравнения имеют бесчисленное множество решений, из которых посредством наложения граничных условий отбирают решения, имеющие физический смысл.

Для уравнения Шредингера такими условиями являются *условия регулярности волновых функций:* волновые функции должны быть конечными, однозначными и непрерывными вместе со своими первыми производными.

Таким образом, реальный физический смысл имеют только такие решения, которые выражаются регулярными функциями ψ. Но регулярные решения имеют место не при любых значениях параметра E, а лишь при определенном их наборе, характерном для данной задачи. Эти ***значения энергии*** называются ***собственными.*** Решения же, которые соответствуют собственным значениям энергии, называются ***собственными функциями.*** Собственные значения E могут образовывать как непрерывный, так и дискретный ряд. В первом случае говорят о ***непрерывном,*** или ***сплошном, спектре,*** во втором — о ***дискретном спектре.***

§ 218. Принцип причинности в квантовой механике

Из соотношения неопределенностей часто делают вывод о неприменимости принципа причинности к явлениям, происходящим в микромире. При этом основываются на следующих соображениях. В классической механике, согласно ***принципу причинности — принципу классического детерминизма,*** по известному состоянию системы в некоторый момент времени (полностью определяется значениями координат и импульсов всех частиц системы) и силам, приложенным к ней, можно абсолютно точно задать ее состояние в любой последующий момент. Следовательно, классическая физика основывается на следующем понимании причинности: состояние механической системы в начальный момент времени с известным законом взаимодействия частиц есть причина, а ее состояние в последующий момент — следствие.

С другой стороны, микрообъекты не могут иметь одновременно и определенную координату, и определенную соответствующую проекцию импульса [задаются соотношением неопределенностей (215.1)], поэтому и делается вывод о том, что в начальный момент времени состояние системы точно не определяется. Если же состояние системы не определенно в начальный момент времени, то не могут быть предсказаны и последующие состояния, т. е. нарушается принцип причинности.

Однако никакого нарушения принципа причинности применительно к микрообъектам не наблюдается, поскольку в квантовой механике понятие состояния микрообъекта приобретает совершенно иной смысл, чем в классической механике. В квантовой механике состояние микрообъекта полностью определяется волновой функцией $\Psi(x, y, z, t)$, квадрат модуля которой $|\Psi(x, y, z, t)|^2$ задает плотность вероятности нахождения частицы в точке с координатами x, y, z.

В свою очередь, волновая функция $\Psi(x, y, z, t)$ удовлетворяет уравнению Шредингера (217.1), содержащему первую производную функции Ф по времени. Это же означает, что задание функции Ψ_0 (для момента времени t_0) определяет ее значение в последующие моменты. Следовательно, в квантовой механике начальное состояние Ψ_0 есть причина, а состояние Ф в последующий момент — следствие. Это и есть форма принципа причинности в квантовой механике, т.е. задание функции Ψ_0 предопределяет ее значения для любых последующих моментов. Таким образом, состояние системы микрочастиц, определенное в квантовой механике, однозначно вытекает из предшествующего состояния, как того требует принцип причинности.

§219. Движение свободной частицы

Свободная частица — частица, движущаяся в отсутствие внешних полей. Так как на свободную частицу (пусть она движется вдоль оси *x)* силы не действуют, то потенциальная энергия частицы *U(x)* = const и ее можно принять равной нулю. Тогда полная энергия частицы совпадает с ее кинетической энергией. В таком случае уравнение Шредингера (217.5) для стационарных состояний примет вид

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi = 0. \qquad (219.1)$$

Прямой подстановкой можно убедиться в том, что частным решением уравнения (219.1) является функция $\psi(x) = Ae^{ikx}$, где A = const и κ = const, с собственным значением энергии

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \qquad (219.2)$$

Функция $\psi(x) = Ae^{ikx} = Ae^{\frac{i}{\hbar}}$ представляет собой только координатную часть волновой функции $\Psi(x, t)$. Поэтому зависящая от времени волновая функция, согласно (217.4),

$$\Psi(x, t) = Ae^{-i\omega t + ikx} = Ae^{-\frac{i}{\hbar}(Et - p_x x)} \qquad (219.3)$$

(здесь $\omega = \frac{E}{\hbar}$ и $k = \frac{p_x}{\hbar}$). Функция (219.3) представляет собой плоскую монохроматическую волну де Бройля [см. (217.2)].

Из выражения (219.2) следует, что зависимость энергии от импульса

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{p_x^2}{2m}$$

оказывается обычной для нерелятивистских частиц. Следовательно, энергия свободной частицы может принимать *любые значения* (так как волновое число *к* может принимать любые положительные значения), т. е. энергетический ***спектр*** свободной частицы является ***непрерывным.***

Таким образом, свободная квантовая частица описывается плоской монохроматической волной де Бройля. Этому соответствует не зависящая от времени плотность вероятности обнаружения частицы в данной точке пространства

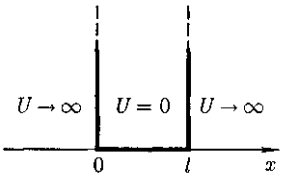
$$|\Psi|^2 = \Psi\Psi^* = |A|^2,$$

т. е. все положения свободной частицы в пространстве являются равновероятными.

§ 220. Частица в одномерной прямоугольной «потенциальной яме» с бесконечно высокими «стенками»

Проведем качественный анализ решений уравнения Шредингера приме-

Рис. 299



нительно к частице **в** одномерной прямоугольной «потенциальной яме» с бесконечно высокими «стенками». Такая «яма» описывается потенциальной энергией вида (для простоты принимаем, что частица движется вдоль оси ***x)***

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

где l — ширина «ямы», **а** энергия отсчитывается от ее дна (рис. 299).

Уравнение Шредингера (217.5) для стационарных состояний в случае одномерной задачи запишется в виде

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\psi = 0. \quad (220.1)$$

По условию задачи (бесконечно высокие «стенки»), частица не проникает за пределы «ямы», поэтому вероятность ее обнаружения (а следовательно, и волновая функция) за пределами «ямы» равна нулю. На границах «ямы» (при x— 0 и $x = l$) непрерывная волновая функция также должна обращаться в нуль. Следовательно, граничные условия в данном случае имеют вид

$$\psi(0) = \psi(l) = 0. \quad (220.2)$$

В пределах «ямы» ($0 \leqslant x \leqslant l$) уравнение Шредингера (220.1) сведется к уравнению

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi = 0$$

или

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + k^2\psi = 0, \quad (220.3)$$

где

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}. \quad (220.4)$$

Общее решение дифференциального уравнения (220.3):

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

Так как по (220.2) $\psi(0) = 0$, то $B = 0$. Тогда

$$\psi(x) = A\sin kx. \quad (220.5)$$

Условие (220.2) $\psi(l) = A\sin kl = 0$ выполняется только при $kl = n\pi$, где n — целые числа, т. е. необходимо, чтобы

$$k = \frac{n\pi}{l}. \quad (220.6)$$

Из выражений (220.4) и (220.6) следует, что

$$E_n = n^2\frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2} \quad (n = 1, 2, 3, \ldots), \quad (220.7)$$

т. е. стационарное уравнение Шредингера, описывающее движение частицы в «потенциальной яме» с бесконечно высокими «стенками», удовлетворяется только при собственных значениях E_n, зависящих от целого числа n. Следовательно, энергия E_n частицы в «потенциальной яме» с бесконечно высокими «стенками» принимает лишь *определенные дискретные значения*, т. е. *квантуется*.

Квантованные значения энергии E_n называются ***уровнями энергии,*** а число n, определяющее энергетические уровни частицы, называется ***главным квантовым числом.*** Таким образом, микрочастица в «потенциальной яме» с бесконечно высокими «стенками» может находиться только на определенном энергетическом уровне E_n, или, как говорят, частица находится в квантовом состоянии n.

Подставив в (220.5) значение k из (220.6), найдем собственные функции:

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

Постоянную интегрирования A найдем из условия нормировки (216.3), которое для данного случая запишется в виде

$$A^2 \int_0^l \sin^2 \frac{n\pi}{l} x \, dx = 1.$$

В результате интегрирования получим $A = \sqrt{\frac{2}{l}}$, а собственные функции будут иметь вид

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{n\pi}{l} x \quad (n = 1, 2, 3, \ldots). \quad (220.8)$$

Графики собственных функций (220.8), соответствующие уровням энергии (220.7) при $n=1,2,3$, приведены на рис. 300, *а*. На рис. 300, *б* изображена плотность вероятности обнаружения частицы на различных расстояниях от «стенок» ямы, равная $|\psi_n(x)|^2 = \psi_n(x)\psi_n^*(x)$ для $n = 1, 2$ и 3. Из рисунка следует, что, например, в квантовом 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.

Из выражения (220.7) вытекает, что энергетический интервал между двумя соседними уровнями равен

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2}(2n+1) \approx \frac{\pi^2 \hbar^2}{ml^2} n. \quad (220.9)$$

Например, для электрона при размерах ямы l — 10^{-1} м (свободные электроны в металле) $\Delta E_n \approx 10^{-35} n$ 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).

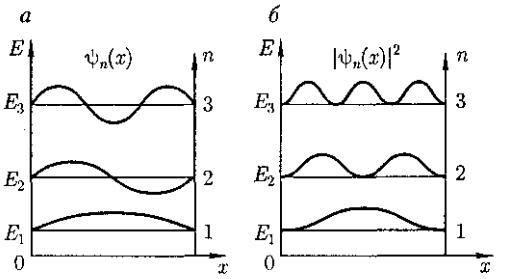


Рис. 300

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.

Кроме того, квантово-механическое рассмотрение данной задачи приводит к выводу, что частица «в потенциальной яме» с бесконечно высокими «стенками» не может иметь энергию меньше минимальной, равной $\frac{\pi^2 \hbar^2}{2}$ [см. (220.7)].

Наличие отличной от нуля минимальной энергии не случайно и вытекает из соотношения неопределенностей. Неопределенность координаты Δx частицы в «яме» шириной l равна $\Delta x = l$. Тогда, согласно соотношению неопределенностей (215.1), импульс не может иметь точное, в данном случае нулевое, значение. Неопределенность импульса $\Delta p \approx \frac{\hbar}{l}$. Такому разбросу значений

импульса соответствует кинетическая энергия

$$E_{\min} \approx \frac{(\Delta p)^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2ml^2}.$$

Все остальные уровни (п > 1) имеют энергию, превышающую это минимальное значение.

Из формул (220.9) и (220.7) следует, что при больших квантовых числах ($n \gg 1$)

$$\frac{\Delta E_n}{E_n} \approx \frac{2}{n} \ll 1,$$

т. е. соседние уровни расположены тесно: тем теснее, чем больше *n*. Если *n* очень велико, то можно говорить о практически непрерывной последовательности уровней и характерная особенность квантовых процессов — дискретность — сглаживается. Этот результат является частным случаем ***принципа соответствия Бора*** (1923), согласно которому законы квантовой механики должны при больших значениях квантовых чисел переходить в законы классической физики.

Более ***общая трактовка принципа соответствия:*** всякая новая, более общая теория, являющаяся развитием классической, не отвергает ее полностью, а включает в себя классическую теорию, указывая границы ее применения, причем в определенных предельных случаях новая теория переходит в старую. Так, формулы кинематики и динамики специальной теории относительности переходят при $v \ll c$ в формулы механики Ньютона. Например, хотя гипотеза да Бройля приписывает волновые свойства всем телам, но в тех случаях, когда мы имеем дело с макроскопическими телами, их волновыми свойствами можно пренебречь, т.е. применять классическую механику Ньютона.

§ 221. Прохождение частицы сквозь потенциальный барьер. Туннельный эффект

Рассмотрим простейший потенциальный барьер прямоугольной формы (рис. 301, *а*) для одномерного (по оси x) движения частицы. Для потенциального барьера прямоугольной формы высотой U и шириной l можем записать

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

При данных условиях задачи классическая частица, обладая энергией *E*, либо беспрепятственно пройдет над барьером (при $E > U$), либо отразится от него (при $E < U$) и будет двигаться в обратную сторону, т.е. она не может проникнуть сквозь барьер. Для микрочастицы, даже при $E > U$, имеется отличная от нуля вероятность, что частица отразится от барьера и будет двигаться в обратную сторону. При $E < U$ имеется также отличная от нуля вероятность, что частица окажется в области $x > l$, т.е. проникнет сквозь барьер. Подобные, казалось бы, парадоксальные выводы следуют непосредственно из решения уравнения Шредингера, опи-

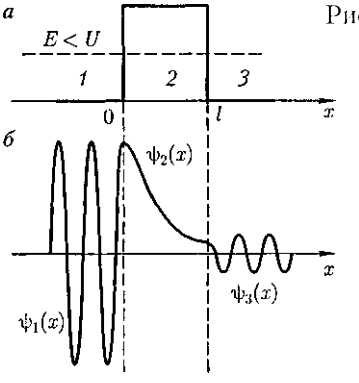


Рис. 301

сывающего движение микрочастицы при условиях данной задачи.

Уравнение Шредингера (217.5) для стационарных состояний для каждой из выделенных на рис. 301, *а* области имеет вид

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

(для областей *1* и *3* $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$);

$$\frac{\partial^2\psi_2}{\partial x^2} + q^2\psi_2 = 0 \qquad (221.1)$$

(для области *2* $q^2 = \frac{2m(E-U)}{\hbar^2}$).

Общие решения этих дифференциальных уравнений:

(для области *1*); (221.2)

$x) = A_2 e^{iqx} + B_2 e^{-iqx}$

(для области 2);

(для области *3*). (,

В частности, для области ***1*** полная волновая функция, согласно (217.4), будет иметь вид

$$\Psi_1(x,t) = \psi_1(x)e^{-\frac{i}{\hbar}Et} = \qquad (221.4)$$
$$= A_1 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et-p_1x)} + B_1 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et+p_1x)}.$$

В этом выражении первое слагаемое представляет собой плоскую волну типа (219.3), 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).

Решение (221.3) содержит также волны (после умножения на временной множитель), распространяющиеся в обе стороны. Однако в области *3* имеется только волна, прошедшая сквозь барьер и распространяющаяся слева направо. Поэтому коэффициент B_3 в формуле (221.3) следует принять равным нулю.

В области *2* решение зависит от соотношений $E>U$ или $E<U$. Физический интерес представляет случай, когда полная энергия частицы меньше высоты потенциального барьера, поскольку при $E<U$ законы классической физики однозначно не разрешают частице проникнуть сквозь барьер. В данном случае, согласно (221.1), $q = i\beta$ — мнимое число, где

$\hbar$

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

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

$$\psi_2(x) = A_2 e^{-\beta x} + B_2 e^{\beta x} \qquad (221.5)$$
(для области *2*);

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

В области *2* функция (221.5) уже не соответствует плоским волнам, распространяющимся в обе стороны, поскольку показатели степени экспонент не мнимые, а действительные. Можно показать, что для частного случая высокого и широкого барьера, когда $\beta l \gg 1$, $B_2 \approx 0$.

Качественный характер функций $\psi_1(x)$, $\psi_2(x)$ и $\psi_3(x)$ иллюстрируется на рис. 301, *б*, откуда следует, что волно-

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

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

Для описания туннельного эффекта используют понятие ***коэффициента прозрачности*** *D* потенциального барьера, определяемого как *отношение плотности потока прошедших частиц к плотности потока падающих.* Можно показать, что

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

Для того чтобы найти отношение $\frac{|A_3|^2}{|A_1|}$, необходимо воспользоваться условиями непрерывности ψ и ψ' на границах барьера $x = 0$ и $x = l$ (рис. 301):

$$\begin{cases} \psi_1(0) = \psi_2(0), \\ \psi_1'(0) = \psi_2'(0), \\ \psi_2(l) = \psi_3(l), \\ \psi_2'(l) = \psi_3'(l). \end{cases} \qquad (221.6)$$

Эти четыре условия дают возможность выразить коэффициенты A_2, A_3, B_1 и B_2 через A_1. Совместное решение уравнений (221.6) для прямоугольного потенциального барьера дает (в предположении, что коэффициент прозрачности мал по сравнению с единицей)

$$D = D_0 \, e^{\left[-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(U-E)}\,dx\right]}, \qquad (221.7)$$

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

Из выражения (221.7) следует, что *D* сильно зависит от массы *m* частицы, ширины / барьера и от $(U - E)$; чем шире барьер, тем меньше вероятность прохождения сквозь него частицы.

Для потенциального барьера произвольной формы (рис. 302), удовлетворяющей условиям так называемого *квазиклассического приближения* (достаточно гладкая форма кривой), имеем

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

где $U = U(x)$.

С классической точки зрения прохождение частицы сквозь потенциальный барьер при $E < U$ невозможно, так как частица, находясь в области барьера, должна была бы обладать отрицательной кинетической энергией. *Туннельный эффект является специфическим квантовым эффектом.*

Прохождение частицы сквозь область, в которую, согласно законам классической механики, она не может проникнуть, можно пояснить соотношением неопределенностей. Неопределенность импульса *Ар* на отрезке $Ax = l$ составляет *Ар* > —. Связанная с этим разбросом в значениях импульса кинети-

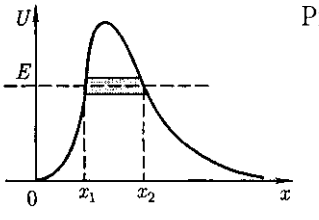


Рис. 302

ческая энергия $\frac{(\Delta p)^2}{2m}$ может оказаться достаточной для того, чтобы полная энергия частицы оказалась больше потенциальной.

Основы теории туннельных переходов заложены в работах Л. И. Мандельштама и М. А. Леонтовича (1903 – 1981). 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).

§ 222. Линейный гармонический осциллятор в квантовой механике

Линейный гармонический осциллятор — система, совершающая одномерное движение под действием квазиупругой силы, — является моделью, используемой во многих задачах классической и квантовой теории (см. § 142). Пружинный, физический и математический маятники — примеры классических гармонических осцилляторов.

Потенциальная энергия гармонического осциллятора [см. (141.5)] равна

$$U = \frac{m\omega_0^2 x^2}{2}, \qquad (222.1)$$

где ω_0 — собственная частота колебаний осциллятора; m — масса частицы.

Зависимость (222.1) имеет вид параболы (рис. 303), т.е. «потенциальная яма» в данном случае является параболической.

Амплитуда малых колебаний классического осциллятора определяется его полной энергией E (см. рис. 17).

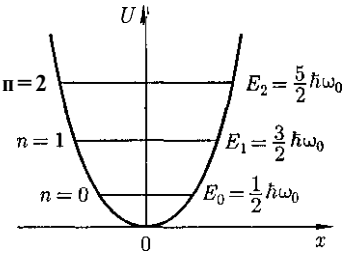


Рис. 303

В точках с координатами $\pm x_{max}$ полная энергия E равна потенциальной энергии. Поэтому с классической точки зрения частица не может выйти за пределы области $(-x_{max}, +x_{max})$. Такой выход означал бы, что ее потенциальная энергия больше полной, что абсурдно, так как приводит к выводу, что кинетическая энергия отрицательна. Таким образом, классический осциллятор находится в «потенциальной яме» с координатами $-x_{max} \leqslant x \leqslant x_{max}$ «без права выхода» из нее.

Гармонический осциллятор в квантовой механике — ***квантовый осциллятор*** — описывается уравнением Шредингера (217.5), учитывающим выражение (222.1) для потенциальной энергии. Тогда стационарные состояния квантового осциллятора определяются уравнением Шредингера вида

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{m\omega_0^2 x^2}{2}\right)\psi = 0, \qquad \textbf{(222.2)}$$

где E — полная энергия осциллятора.

В теории дифференциальных уравнений доказывается, что уравнение (222.2) решается только при собственных значениях энергии

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_0. \qquad \textbf{(222.3)}$$

Формула (222.3) показывает, что энергия квантового осциллятора может

иметь лишь *дискретные значения,* т. е. *квантуется.* Энергия ограничена снизу отличным от нуля, как и для прямоугольной «ямы» с бесконечно высокими «стенками» (см. § 220), минимальным значением энергии $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega_0$. Существование минимальной энергии — она называется ***энергией нулевых колебаний*** — является типичной для квантовых систем и представляет собой прямое следствие соотношения неопределенностей.

Наличие нулевых колебаний означает, что частица не может находиться на дне «потенциальной ямы» (независимо от формы ямы). В самом деле, «падение на дно ямы» связано с обращением в нуль импульса частицы, а вместе с тем и его неопределенности. Тогда неопределенность координаты становится сколь угодно большой, что противоречит, в свою очередь, пребыванию частицы в «потенциальной яме».

Вывод о наличии энергии нулевых колебаний квантового осциллятора противоречит выводам классической теории, согласно которой наименьшая энергия, которую может иметь осциллятор, равна нулю (соответствует покоящейся в положении равновесия частице). Например, согласно выводам классической физики при $T = 0$ энергия колебательного движения атомов кристалла должна была бы обращаться в нуль. Следовательно, должно исчезать и рассеяние света, обусловленное колебаниями атомов. Однако эксперимент показывает, что интенсивность рассеяния света при понижении температуры не равна нулю, а стремится к некоторому предельному значению, указывающему на то, что при $T \to 0$ колебания атомов в кристалле не прекращаются. Это является подтверждением наличия нулевых колебаний.

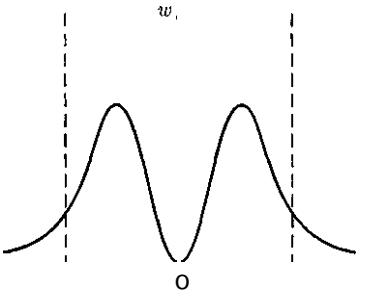


Рис. 304

Из формулы (222.3) также следует, что уровни энергии линейного гармонического осциллятора расположены на одинаковых расстояниях друг от друга (см. рис. 303), а именно расстояние между соседними энергетическими уровнями равно $\hbar\omega_0$, причем минимальное значение энергии $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega_0$.

Строгое решение задачи о квантовом осцилляторе приводит еще к одному значительному отличию от классического рассмотрения. Квантово-механический расчет показывает, что частицу можно обнаружить за пределами дозволенной области $-x_{max} \leqslant x \leqslant x_{max}$ (см. рис. 17), в то время как с классической точки зрения она не может выйти за пределы этой области.

Таким образом, имеется отличная от нуля вероятность обнаружить частицу в той области, которая является классически запрещенной. Этот результат (без его вывода) демонстрируется на рис. 304, где приводится квантовая плотность вероятности w обнаружения осциллятора для состояния $n = 1$. Из рисунка следует, что для квантового осциллятора действительно плотность вероятности w имеет конечные значения за пределами классически дозволенной области $|x| \geqslant x_{max}$, т.е. имеется конечная (но небольшая) вероятность обнаружить частицу в области за предела-

ми «потенциальной ямы». Существование отличных от нуля значений w за пределами «потенциальной ямы» объясняется возможностью прохождения микрочастиц сквозь потенциальный барьер (см. § 221).

Контрольные вопросы

- Чему равны фазовая и групповая скорости фотона?
- В каком случае и почему при условиях $\frac{\Delta v_x}{v_x} \ll 1$ и $\frac{\Delta v_x}{v_x} \approx 1$ можно говорить о движении частицы по определенной траектории?
- Как исходя из соотношения неопределенностей объяснить наличие естественной ширины спектральных линий?
- Что определяет квадрат модуля волновой функции?
- Почему квантовая механика является статистической теорией?
- В чем отличие понимания причинности в классической и квантовой механике?
- Какова наименьшая энергия частицы в «потенциальной яме» с бесконечно высокими «стенками»?
- Больше или меньше энергия частицы, находящейся в «потенциальной яме» с бесконечно высокими «стенками», в состоянии $n = 3$ по сравнению с состоянием $n = 1$? Во сколько раз?
- Какими свойствами микрочастиц обусловлен туннельный эффект?
- В чем отличие поведения классической и квантовой частиц с энергией $E < U$ при их движении к прямоугольному потенциальному барьеру конечной ширины?
- Как изменится коэффициент прозрачности потенциального барьера с ростом его высоты? с увеличением массы частицы? с увеличением полной энергии частицы?
- Как изменится коэффициент прозрачности потенциального барьера с увеличением его ширины в два раза?
- Чему равна разность энергий между четвертым и вторым энергетическими уровнями квантового осциллятора?
- Может ли частица находиться на дне «потенциальной ямы»? Определяется ли это формой «ямы»?
- Зависит ли распределение энергетических уровней от формы «потенциальной ямы»? Ответ проиллюстрировать.
- В чем отличие квантово-механического и классического описания гармонического осциллятора? В выводах этих описаний?

ЗАДАЧИ

28.1. Свободная частица движется со скоростью u. Докажите, что выполняется соотношение $v_{фаз} u = c^2$.

28.2. Электрон движется в атоме водорода по первой боровской орбите. Принимая, что допускаемая неопределенность скорости составляет 1 % от ее числового значения, определите неопределенность координаты электрона. Применимо ли в данном случае для электрона понятие траектории? [Δx = 33 им; нет]

28.3. ψ-Функция некоторой частицы имеет вид $\psi = -e^{-a}$, где r — расстояние этой частицы от силового центра, a — постоянная. Определите среднее расстояние $\langle r \rangle$ частицы от силового центра. [$\langle r \rangle = \frac{a}{2}$]