

НОВОСИБИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ  
АГРАРНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

ИНЖЕНЕРНЫЙ ИНСТИТУТ

**ЭЛЕМЕНТЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ**

Учебное пособие

Новосибирск 2011

УКД 53:(07)  
ББК 22.314, я7  
Э 456

Кафедра теоретической и прикладной физики

Составители: канд. техн. наук, доц. *В.Я. Чечуев*; канд. техн. наук, доц. *С.В. Викулов*; канд. с-х. наук, доц. *Л.А. Митина*

Рецензенты: д-р. физ.-мат. наук, проф. *М.П. Синюков* (НГАВТ); канд. физ.-мат. наук *В.И. Сигимов* (НГАВТ)

**Элементы квантовой механики:** учеб. пособие / Новосибир. гос. аграр. ун-т; сост.: *В.Я. Чечуев, С.В. Викулов, Л.А. Митина*. – Новосибирск: Изд-во НГАУ, 2011. – 59 с.

Данное пособие содержит материал, изучаемый, согласно программе, в курсе общей физики. Иначе, чем в известной литературе, изложены гипотеза де Бройля и принцип неопределенности Гейзенберга. В остальных разделах изучаемый материал рассмотрен с достаточными подробностями.

Предназначено для студентов дневной и заочной формы обучения всех направлений подготовки Новосибирского государственного аграрного университета.

Утверждено и рекомендовано к изданию методическим советом Инженерного института (протокол №12 от 30 ноября 2010 г.).

## ВВЕДЕНИЕ

При переходе от невысоких скоростей к субсветовым классическая механика перестает давать правильные результаты, и для их получения надо пользоваться релятивистской механикой Эйнштейна. В ядерной физике, как правило, приходится иметь дело именно с очень высокими скоростями.

Но ядерная физика обладает и ещё одной особенностью: она имеет дело с микрообъектами, размеры которых можно считать равными  $10^{-15} \div 10^{-14}$  м, а массу –  $10^{-30} \div 10^{-25}$  кг. А для столь малых частиц неприменим общепринятый способ описания их движения, которым мы пользуемся в обычной механике.

Напомним, что движение тела в классической механике описывается заданием его траектории. Материальная точка может двигаться, например, по прямолинейной траектории, по окружности, по спирали, по параболе и т.п. С помощью уравнений движения классической механики, основанных на законах Ньютона, можно рассчитать положение материальной точки на траектории, т.е. найти ее координаты в любой момент времени, можно найти её скорость в этой точке и ускорение.

Используя этот подход, люди уже давно научились предсказывать солнечные и лунные затмения, движение планет и комет. Сейчас с огромной степенью точности рассчитываются траектории баллистических ракет, спутников, космических кораблей и межпланетных станций. И сложность этих расчетов носит вычислительный, а не принципиальный характер.

Некоторое добавочное усложнение расчетов возникает при движении частиц или тел с субсветовыми скоростями. Но и в этом случае усложнение не носит

принципиального характера, так как основное представление о том, что движение частицы происходит по определенной траектории, сохраняется и в релятивистской механике.

Принципиальные трудности возникают при попытке перенести методы обычной механики (классической или релятивистской) на мир микрочастиц. А именно таким способом действовали вначале физики в своих попытках объяснить строение и свойства атома.

## 1. КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ БОРА

Атомное ядро было открыто Резерфордом в 1911 г. в опытах по изучению рассеяния частиц на тонких фольгах. Чтобы объяснить отклонение небольшой доли частиц на большие углы (до  $180^\circ$ ), Резерфорд предположил, что в центре каждого атома расположено тяжелое (до 99,98% массы всего атома) положительно заряженное ядро очень малых размеров ( $10^{-15} \div 10^{-14}$  м). Вокруг ядра на относительно больших расстояниях (порядка  $10^{-10}$  м) вращаются  $z$  электронов ( $z$  – порядковый номер элемента в периодической таблице Менделеева). Эта модель была названа ядерной, или планетарной, так как в соответствии с ней строение атома напоминает миниатюрную Солнечную систему, в которой роль Солнца играет ядро, роль планет – электроны, а роль гравитационного притяжения – кулоновское взаимодействие между разноименно заряженным ядром и электронами.

Однако с этой моделью возникли серьезные затруднения, так как она не удовлетворяла условию устойчивости.

Дело в том, что, согласно классической электродинамике, заряженная частица, движущаяся с ускорением, обязательно должна тратить свою энергию на

излучение. Электрон, вращающийся вокруг атомного ядра, имеет центростремительное ускорение, а значит, из-за излучения его энергия должна постепенно уменьшаться. Уменьшение энергии будет приводить к снижению скорости вращения, т.е. центробежной силы, которая перестанет уравнивать силу кулоновского притяжения. В результате электрон начнет по спирали приближаться к ядру и в конце концов упадет на него. Выходит, если поверить планетарной модели, то атом надо сравнивать не с Солнцем и планетами, а, скорее, с Землей, вокруг которой в пределах атмосферы вращаются искусственные спутники. Из-за сопротивления воздуха спутники постепенно снижают свою скорость и приближаются к Земле по спирали. Таким образом, по планетарной модели получается, что все атомы должны быть неустойчивы. А это противоречит эксперименту.

Другое, не менее важное, возражение против планетарной модели заключается в том, что она допускает испускание атомами светового излучения любой длины волны, в то время как из опыта следует, что конкретные атомы испускают излучение только строго определенных длин волн.

Выход из затруднений был предложен в 1913 г. Бором, правда, ценой введения предположений, противоречащих классическим представлениям. Допущения, сделанные Бором, содержатся в двух высказанных им постулатах:

1. В атоме существуют стационарные (не изменяющиеся со временем) состояния, в которых он не излучает энергии. Двигаясь по стационарным орбитам, электрон должен иметь дискретные квантованные значения момента импульса, удовлетворяющие условию

$$m_e v r_n = n \hbar \quad (n = 1, 2, 3...), \quad (1.1)$$

где  $m_e$  – масса электрона;  $v$  – его скорость на  $n$ -й орбите радиуса  $r_n$ ;  $\hbar = \frac{h}{2\pi}$  – постоянная Планка.

2. При переходе электрона с одной стационарной орбиты на другую излучается (поглощается) один фотон с энергией

$$h \nu = E_n - E_m, \quad (1.2)$$

равной разности энергий соответствующих стационарных состояний. При  $E_m < E_n$  происходит излучение фотона, при  $E_m > E_n$  – его поглощение. Набор возможных дискретных частот (ню)  $\nu = \frac{E_n - E_m}{h}$  квантовых переходов и определяет линейчатый спектр атома.

На основании расчетов, сделанных по теории Бора, были предсказаны и обнаружены экспериментально новые спектральные серии атома водорода. В дальнейшем теория Бора была усовершенствована другими физиками.

Круговые орбиты были заменены эллиптическими, движение электронов по ним стали рассчитывать не по классической, а по релятивистской механике и др.

Все это позволило еще лучше понять наблюдаемые закономерности в оптических спектрах, в частности, объяснить поведение излучающего атома в магнитном поле, природу тонкого, а впоследствии и сверхтонкого расщепления спектральных линий.

Однако вместе с успехами теории накапливались и возражения против нее. Дело в том, что для каждого усовершенствования теории в нее приходилось вводить всё новые и новые квантовые числа. Вслед за главным квантовым числом  $n$  в теорию были введены орбитальное квантовое число  $\ell$ , а затем магнитное  $m$  и спиновое  $s$  квантовые числа.

Правда, каждое из них вводилось вполне логично – как мера квантования момента импульса или его проекции. Но каждый раз эти квантовые числа и диапазон возможных значений для них приходилось *постулировать*.

Сначала были постулированы возможные значения квантовых чисел, затем их пришлось ограничить специальными запретами (правила отбора). Потом для объяснения периодической системы элементов Менделеева пришлось постулировать принцип Паули, который запрещает двум электронам находиться в одном и том же состоянии (иметь одинаковыми все четыре квантовых числа).

Но, несмотря на это, теория оказалась неприменимой уже к следующему атому – атому He. Эта неудача теории объясняется тем, что в ней движение электронов в атоме происходит по определенным траекториям подобно тому, как это имеет место в обычной механике. А между тем опыт доказывает, что для микрочастицы понятие траектории теряет смысл.

## **2. ВОЛНЫ ДЕ БРОЙЛЯ**

Бессмысленность понятия траектории проще всего почувствовать на некоторой классической аналогии. Представьте себе, что вы находитесь на производственной практике по ремонту дома и занимаетесь очисткой стен с помощью пескоструйного аппарата. Песчинки, вылетающие из этого аппарата по прямолинейным траекториям, с силой ударяются о стену и очищают её от грязи. Что будет, если между аппаратом и стеной поставить лист железа с прорезью? Ну, конечно, стена будет очищаться только напротив прорези. А если две прорези? Тогда на стене будут две светлые полосы независимо от того, откроете ли

вы обе прорези одновременно или сначала одну, а потом другую (рис. 2.1 а, б).

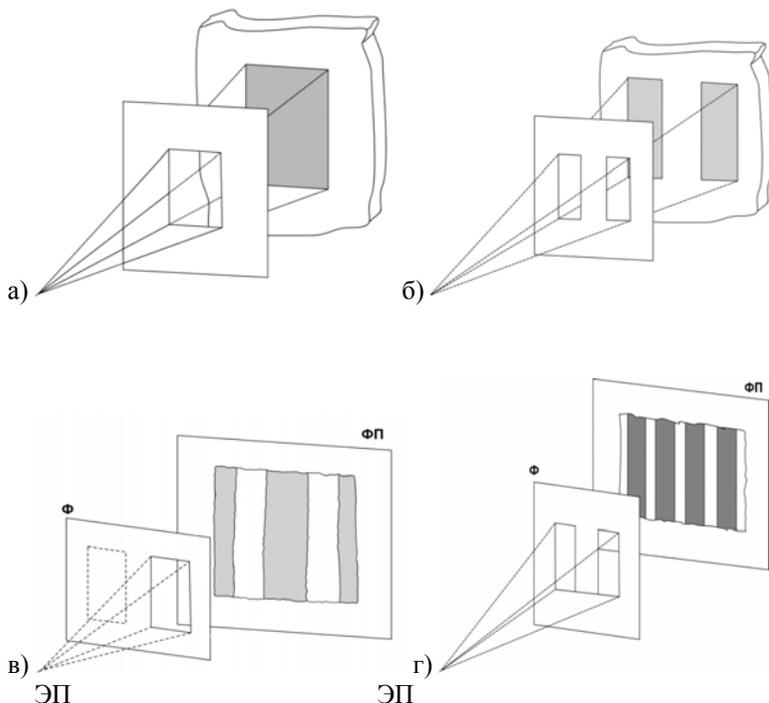


Рис. 2.1

А теперь со стройплощадки перейдем в физическую лабораторию и поставим следующий опыт. Заменяем пескоструйный аппарат электронной пушкой (ЭП), которая «выстреливает» электроны с одной и той же скоростью в одном и том же направлении; железный лист с прорезью заменим небольшим листочком фольги (Ф) с двумя узкими «щелями» (почему мы взяли слово «щель» в кавычки, поясним позже), а кирпичную стену – фотопластинкой (ФП). Закроем одну «щель» (например, левую) и включим на некоторое время электронную пушку, а затем проявим

фотопластинку. Опираясь на свой опыт на стройплощадке и на здравый смысл, вы вправе ожидать, что на фотопластинке в миниатюре получится рисунок, аналогичный картине на кирпичной стене при одной прорези в железном листе. На самом деле на фотопластинке получится картина, изображенная на рис. 2.1 в. Вы видите, что по форме она резко отличается от картины на стене. Электроны попадают на фотопластинку не только в место, расположенное против открытой правой «щели», но и на некотором от нее расстоянии по бокам. Создается такое впечатление, что часть электронов при прохождении через щель отклоняется от прямолинейной траектории на строго определенные углы.

В связи с этим возникают два вопроса. Первый – почему электроны отклоняются от прямолинейного направления и второй – почему одни электроны отклоняются, а другие – нет? Ведь все электроны одинаковы и испускаются из пушки с одной и той же скоростью и в одном и том же направлении. Начнем со второго вопроса. Ответ на него выглядит довольно неожиданно. Оказывается, все электроны ведут себя одинаково, но одинаково странно. Любой из них может как отклониться, так и пролететь прямо.

В том, что дело обстоит именно так, можно убедиться опять на опыте. Для этого надо снизить частоту выстрелов из нашей пушки настолько, чтобы электроны вылетали из нее поодиночке (как снаряды из настоящей пушки). И вот если в таких условиях снова облучать фотопластинку столько времени, чтобы общее число попавших в нее электронов было такое же, как и в первом случае, то картина полностью повторится. Другими словами, ни один электрон, вылетающий из электронной пушки, не имеет определенной траектории. Каждый из них может попасть в любую точку затемненной области фотопленки. В этом

видна некоторая неопределенность движения электрона с точки зрения классических представлений. Но в то же время все электроны попадают только в затемнённую область, ни один электрон не может попасть в незатемнённую область пластинки, и в этом видна какая-то закономерность их движения.

Движение отдельного электрона происходит так, что его возможные координаты на пластинке можно указать не однозначно, а только с некоторой *вероятностью*. Вероятность попадания электрона в одни места (наиболее затемнённые) велика, в другие (посветлее) – мала, для третьих (светлых) она вообще равна нулю. Но сколько бы раз мы не ставили опыт, результаты (при одинаковых условиях) будут получаться одни и те же. Сравнительная интенсивность потемнения пластинки в разных местах, расстояния между темными и светлыми местами, градации потемнения – все это будет повторяться. Таким образом, несмотря на отсутствие траектории, движение электрона происходит по определенному закону. Он проявляется в неизменности результата при повторении опыта.

Продолжим наш опыт. Закроем правую «щель», откроем левую и повторим опыт. Что случится теперь? Здравый смысл подсказывает: то же, что и раньше, но центр картины будет находиться против левой «щели». На этот раз мы отгадали.

Ну, а что будет, если открыть обе «щели»? Оказывается, в этом случае опять ничего предсказать не удастся. Картина на фотопластинке для этого случая (рис. 2.1 г) совсем не похожа на классическую картину (две прорези в железном листе), изображенную на рис. 2.1 б. Более того, она не похожа и на сумму картин левой и правой «щелей». Вторая «щель» не добавляет новых деталей к картине от первой «щели», а радикально изменяет всю картину в целом. И эту новую картину можно опять получить, если

заставить электроны вылетать из пушки поодиночке. Таким образом, и в этом случае каждый электрон движется вполне закономерно. При повторении опыта неизменно повторяется картина, характерная для двух «щелей».

Вместе с тем, сохраняется и известная неопределенность в движении электрона, которая сказывается в том, что нельзя заранее предсказать, в какое место фотопластинки попадет данный конкретный электрон. Так же как и в опыте с одной «щелью», можно указать только вероятность того, что электрон попадет в данное место пластинки. Другими словами, можно предсказать, какая доля всех вылетевших из пушки электронов попадает в то или иное место фотопластинки. Путь же конкретного электрона неисповедим, и за это очень хочется его обозвать «непутевым».

Неопределенность заключается также в том, что относительно каждого электрона нельзя сказать, через какую именно «щель» он пролетел. Действительно, если бы каждый электрон проходил только через одну «щель» (левую или правую), то вторая не принимала бы никакого участия в формировании картины. А между тем картина получается характерной именно для двух «щелей». Значит, каждый электрон движется так, что он как бы одновременно проходит через обе «щели». Да, да, через обе! Хоть и непутёвый, но вездесущий!

Итак, подведем предварительные итоги. Электроны в нашем опыте движутся таким образом, что для них *нельзя ввести понятие траектории*. Создается впечатление, что один и тот же электрон может одновременно оказаться в двух и более (для случая с большим числом «щелей») разных местах. Вместе с тем, движение электронов подчиняется какой-то закономерности, так как картина при повторном опыте в аналогичных условиях всегда повторяется.

Какова же эта закономерность? Оказывается, картина, полученная от фольги с одной «щелью», похожа на картину дифракции света от узкой щели. Это не случайное совпадение. Картина же, полученная в мысленном опыте с электронами при двух «щелях», аналогична картине дифракции света от двух щелей. Так же обстоит дело и при большем числе щелей, когда дифракция происходит на дифракционной решетке, т.е. на пластинке с большим числом периодически расположенных узких просветов. Детальное количественное изучение этого вопроса показало, что от пучка электронов с данной скоростью  $v$  (данном импульсом  $\vec{P} = m_0\vec{v}$ ) получается такая же дифракционная картина, как и от монохроматического электромагнитного излучения длины волны

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p} \text{ или } \tilde{\lambda} = \frac{\hbar}{p}, \quad (2.1)$$

где  $\tilde{\lambda} = \frac{\lambda}{2\pi}$ .

(Полагаем, что кинетическая энергия электронов  $E_k \approx 10$  эВ. В этом случае можно пользоваться классическими формулами.)

Таким образом, движение электронов носит *волновой характер*.

Величина, определяемая соотношением (2.1), называется *длиной волны де Бройля*, по имени физика, впервые в 1924 г. предположившего, что частицам вещества присущи волновые свойства (гипотеза де Бройля).

Из оптики известно, что дифракция наблюдается, когда ширина щели соизмерима с длиной волны света. Так как длина волны видимого света заключена в интервале от 0,4 до 0,8 мкм, дифракция света наблюдается на щелях или препятствиях микронных размеров. Ширину «щели» для

изучения дифракции электронов можно найти аналогично. Она должна быть примерно равна длине волны де Бройля.

Пусть электроны имеют энергию 10 эВ. Тогда:

$$p = \sqrt{2m_e E_k}$$
$$\lambda = \frac{\hbar}{\sqrt{2m_e E_k}} = \frac{1,05 \cdot 10^{-24}}{\sqrt{2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-21} \cdot 10 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}}} = 0,66 \cdot 10^{-10} \text{ м.}$$

Итак, дифракция электронов энергией 10 эВ должна наблюдаться при ширине «щели» порядка  $10^{-10}$  м. Но  $10^{-10}$  м – это размеры атома и межатомные расстояния. Теперь понятно, почему мы слово «щель» взяли в кавычки. Конечно, не может быть и речи о том, чтобы искусственно приготовить фольгу с одной или двумя щелями такой ширины. Все рассуждения, относящиеся к мысленному опыту, мы провели для наглядности.

На самом деле, дифракция изучалась на кристалле, атомы в котором образуют естественную решетку, изготовленную самой природой. Но в этих условиях опыт перестает быть мысленным, и он действительно был осуществлен Дэвиссоном и Джермером в 1927 г. и действительно дал результаты, аналогичные полученным в оптике. Впоследствии опыт с успехом был повторен Фабрикантом в условиях, когда электроны вылетали очень редко, поодиночке. Таким образом, было доказано, что электрон ведет себя подобно волне.

Обратите внимание на то, что речь идет об отдельных электронах. Каждый отдельный электрон ведет себя как волна. Он когерентен сам себе, интерферирует сам с собой и благодаря этому дифрагирует на кристаллической решётке.

Однако из того, что электрон ведет себя как волна, нельзя делать вывод о том, что электрон есть волна, что он состоит из волн. Действительно, хотя в принципе из

плоских волн с разными дебройлевскими длинами можно сконструировать волновой пакет, имеющий в начальный момент времени  $t = 0$  размеры и импульс электрона, но, как показывает расчёт, с течением времени размеры этого пакета чрезвычайно быстро растут (расплывание волнового пакета). А это противоречит любому опыту с электронами. Кроме того, представление об электроне-волне связано с предположением о том, что в процессе дифракции каждый электрон должен одновременно лететь в разных направлениях, т.е. разделяться на части, что тоже противоречит опыту. Электрон всегда обнаруживается где-то в одном месте (темная точка на фотопластинке). Он всегда проявляется как единая неделимая частица с данным зарядом  $e$  и данной массой  $m_e$ . Таким образом, электрон движется как волна, оставаясь частицей. Можно сказать, что электрон имеет двойственную природу: волновую и корпускулярную (именно в этом состоит гипотеза де Бройля). В связи с этим у него нет траектории.

### 3. СООТНОШЕНИЕ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТЕЙ

Тогда что же такое те следы, которые электроны (и другие заряженные частицы) оставляют в камерах Вильсона, в пузырьковых камерах или в фотоэмульсии? Разве это не изображение траектории? Ведь след очень похож на траекторию. Часто он имеет очень большую длину (тысячи микрон) по сравнению с толщиной (около 0,5 мкм). Он позволяет каждому моменту времени сопоставить определенную область фотопластинки, т.е. казалось бы координаты электрона, а также его энергию, т.е. импульс. И все-таки след это не траектория. В самом деле, посчитаем, с какой точностью можно определить координаты электрона по его следу. «Толщина» следа в фотоэмульсии не может быть

меньше диаметра одного проявленного зерна, т.е.  $0,5 \text{ мкм} = 5 \cdot 10^{-7} \text{ м}$ . Это в  $5000 \text{ раз}$  больше размеров атома и в  $100000000 \text{ раз}$  больше классического радиуса электрона  $r_e = 2,8 \cdot 10^{-15} \text{ м}$ . Как вы думаете, назвали бы мы с вами траекторией путь пули, если бы его ширина равнялась  $100000000$  его радиусов, т.е. около  $1000 \text{ км}$ ?! Вероятно, нет, так как «непутёвость» пули здесь вполне очевидна.

Итак, у электрона нет траектории в строгом смысле этого слова. Его положение можно определить лишь приближенно. В нашем мысленном опыте получилось, что при энергии электронов  $10 \text{ эВ}$ , т.е. при импульсе  $3 \cdot 10^3 \text{ эВ/с}$ , неопределённость в его координате  $\Delta x$  составляет  $0,66 \cdot 10^{-10} \text{ м}$ . Если перемножить эти две величины, то получится

$$\begin{aligned} & 3 \cdot 10^3 \text{ эВ/с} \cdot 0,66 \cdot 10^{-10} \text{ м} = \\ & = \frac{3 \cdot 10^3 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} \cdot 0,66 \cdot 10^{-10}}{3 \cdot 10^8} = 1,05 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}, \end{aligned}$$

т.е. величина, равная *постоянной* Планка  $\hbar$ . Это не случайный результат. Вспомним, что неопределённость в координате  $\Delta x$  равна расстоянию между щелями (и ширине щели  $\delta$ ) и дифракция наблюдается при ширине щели, равной длине волны:

$$\Delta x = \delta = \lambda.$$

Но  $\lambda$  – это длина волны де Бройля. Она равна  $\frac{\hbar}{p}$ ,

поэтому всегда  $\Delta x \cdot p \approx \hbar$ . Наконец, сделаем еще одно замечание, прежде чем сформулировать очень важный результат. При прохождении электрона через решётку и попадании его на фотопластинку импульс электрона может измениться на свою полную величину  $\Delta p = p$  (например, электрон при столкновении с электроном атома решетки может остановиться, так что его импульс будет равен

нулю). Таким образом, импульс электрона после прохождения его через пластинку со щелями становится неопределённым. Заменяв  $p$  на  $\Delta p$  в выражении  $\Delta x \cdot p \approx \hbar$ , получим универсальное соотношение микромира

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \approx \hbar, \quad (3.1)$$

справедливое при любых энергиях электрона. Это выражение называется соотношением неопределенностей Гейзенберга (принципом неопределенности). Оно отражает специфику свойств микрочастиц, для которых нельзя одновременно точно знать координату и импульс, т.е. нельзя задать траекторию. Чем точнее определяется импульс, тем больше неопределенность в её координате, и наоборот.

Соотношение (3.1) может быть получено также из рассмотрения следующего примера. Попытаемся определить значение координаты  $X$  свободно летящего электрона, поставив на его пути щель шириной  $\Delta X$ , расположенную перпендикулярно к направлению движения электрона (рис. 3.1).

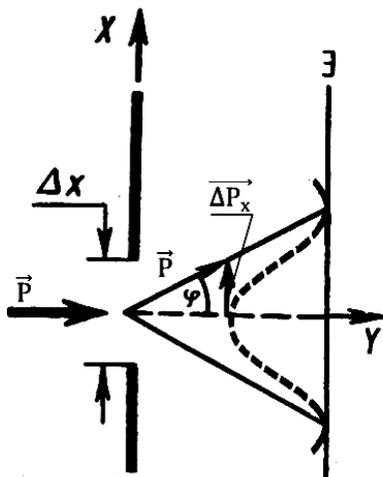


Рис. 3.1

До прохождения электрона через щель его компонента импульса  $p_x$  имеет точное значение, равное нулю (щель по условию перпендикулярна импульсу), так что  $\Delta p_x = 0$ , зато координата  $x$  электрона является совершенно неопределенной. В момент прохождения электрона через щель положение меняется. Вместо полной неопределенности координаты  $x$  появляется неопределенность  $\Delta x$ , но это достигается ценой утраты определенности значения  $p_x$ . Действительно, вследствие дифракции имеется некоторая вероятность того, что частица будет двигаться в пределах угла  $2\varphi$ , где  $\varphi$  – угол, соответствующий первому дифракционному минимуму (максимумами высших порядков пренебрегаем). Таким образом, появляется неопределенность  $\Delta p_x = p \sin \varphi$ .

К краю центрального дифракционного максимума (первому минимуму), получающемуся от щели шириной  $\Delta x$ , соответствует угол  $\varphi$ , для которого

$$\sin \varphi = \frac{\lambda}{\Delta x}.$$

Подставляя это значение  $\sin \varphi$  в предыдущую формулу, получим:

$$\Delta p_x = \frac{p\lambda}{\Delta x},$$

или с учетом (3.1) будем иметь

$$\Delta x \cdot \Delta p_x = p\lambda = 2\pi\hbar.$$

Учет максимумов высших порядков приводит к результату

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (3.2)$$

Соотношение (3.2) обусловлено корпускулярно-волновой природой электронов (и любых микрочастиц). Оно указывает, в какой мере можно пользоваться

понятиями классической механики применительно к микрочастицам, в частности, с какой степенью точности можно говорить о траектории микрочастиц. Движение по траектории характеризуется вполне определенными значениями координат и скорости в каждый момент времени. Подставив вместо  $p_x$  в (3.2) произведение  $mv_x$ , получим соотношение

$$\Delta x \cdot \Delta v_x \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (3.3)$$

Из (3.3) следует: чем больше масса частицы, тем меньше неопределенности ее координаты и скорости, а значит, с тем большей точностью применимо понятие траектории. Уже для макрочастиц размером всего 1 мкм неопределенность значений  $x$  и  $v_x$  оказывается за пределами точности измерения этих величин, так что практически её движение будет неотличимо от движения по траектории.

При определенных условиях даже движение микрочастиц может приближенно рассматриваться как происходящее по траектории. В качестве примера рассмотрим движение электрона в электронно-лучевой трубке.

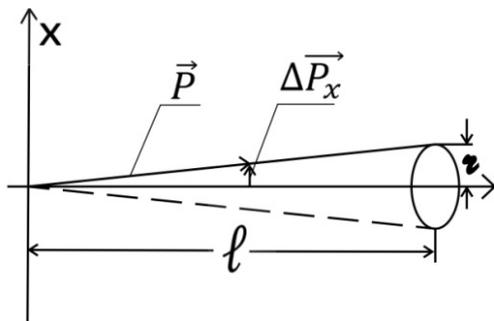


Рис. 3.2

Оценим неопределенность координаты и импульса электрона для этого случая. Пусть след электронного пучка

на экране имеет радиус  $r = 10^{-2}$  мм, длина трубки  $\ell = 100$  мм (рис 3.2). Тогда  $\frac{\Delta p_x}{p} \sim 10^{-4}$ . Импульс электрона связан с ускоряющим напряжением соотношением  $\frac{p^2}{2m} = eU$ . Отсюда  $p = \sqrt{2meU}$ . При напряжении  $U \sim 10^4$  В энергия электрона равна  $10^4$  эВ  $= 1,65 \cdot 10^{-15}$  Дж. Оценим импульс электрона:

$$p = \sqrt{2 \cdot 0,91 \cdot 10^{-30} \cdot 1,65 \cdot 10^{-15}} = 5 \cdot 10^{-23} \text{ кг} \cdot \text{м/с}.$$

$$\text{Следовательно, } \Delta p_x = 5 \cdot 10^{-23} \cdot 10^{-4} = 5 \cdot 10^{-27} \text{ кг} \cdot \text{м/с}.$$

Наконец, согласно (3.2)

$$\Delta x = \frac{\hbar}{2\Delta p_x} = \frac{1,05 \cdot 10^{-34}}{2 \cdot 5 \cdot 10^{-27}} \approx 10^{-8} \text{ м} = 10^{-5} \text{ мм} = 10^{-3} r.$$

Полученный результат указывает на то, что движение электрона в электронно-лучевой трубке практически неотличимо от движения по траектории.

Соотношение, аналогичное (3.2), существует также между энергией частицы и временем измерения этой энергии  $\Delta t$  (или временем жизни частицы):

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (3.4)$$

Из (3.4) следует, чем больше время жизни частицы, тем точнее определена ее энергия (а значит и масса, так как  $m = \frac{E}{c^2}$ ), и наоборот.

Энергия электронов в рассмотренном нами мысленном опыте была выбрана 10 эВ, а неопределенность в траектории получилась порядка  $10^{-10}$  м. Но первое значение характерно для энергии внешних электронов в атоме, а второе – для его размеров. Значит, электроны в пределах атома должны двигаться столь же неопределенно,

как и в нашем мысленном эксперименте. К ним нельзя применить обычную механику.

Новая теория, преодолевшая недостатки теории Бора, была создана Гейзенбергом, Шрёдингером и Дираком. Она была названа квантовой (или волновой) механикой. Как сказал кто-то из физиков: «Понять квантовую механику невозможно, к ней можно только привыкнуть». И это очень точно сказано. Квантовую механику нельзя понять, опираясь на классические представления. Это область науки, которую надо строить на совершенно новом фундаменте, на абсолютно новых представлениях.

#### 4. ВОЛНОВАЯ ФУНКЦИЯ

Де Бройль связал со свободно движущейся частицей плоскую волну. Реальная плоская, распространявшаяся в направлении оси  $X$ , волна описывается уравнением

$$\zeta = A \cdot \cos(\omega t - kx) = A \cdot \cos\left(\omega t - \frac{2\pi x}{\lambda}\right).$$

Заменив в соответствии с формулами  $\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p}$  и

$\omega = \frac{E}{\hbar}$   $\omega$  и  $\lambda$  через  $E$  и  $p$ , уравнение волны де Бройля для

свободной частицы пишут в виде

$$\psi = A \cdot e^{\frac{i}{\hbar}(px - E \cdot t)}.$$

Функцию  $\psi$  называют волновой функцией (или псифункцией). Она отражает волновую природу микрочастиц. С её помощью можно описать, например, рассмотренное выше явление дифракции электронов. Для  $\psi$ -функции, так же как для световой волны, можно говорить о когерентности, о фазе, о разности хода и других специфических волновых понятиях. Однако в отличие от решения уравнений

Максвелла  $\psi$ -функция, вообще говоря, комплексна и не имеет наглядного истолкования. Это не реальная бегущая волна типа распространяющегося света или звука и не реальная стоячая волна типа интерференционной картины, а волна (т.е. амплитуда и фаза) вероятности, которая описывает объективно существующие потенциальные возможности осуществления того или иного результата.

Согласно Борну, наглядный смысл имеет только квадрат модуля волновой функции,  $\psi\psi^* = |\psi|^2$ , который определяет вероятность  $dp$  того, что частица будет обнаружена в пределах объема  $dV$ :

$$dp = |\psi|^2 dV = \psi\psi^* dV. \quad (4.1)$$

Вот это свойство  $\psi$ -функции и отражает вторую (корпускулярную) сторону поведения микрочастиц.

Интеграл от (4.1), взятый по всему пространству, должен равняться единице:

$$\int_v \psi\psi^* dV = 1 \quad (4.2)$$

Действительно, этот интеграл дает вероятность того, что частица находится в одной из точек пространства, т.е. вероятность достоверного события, которая равна единице.

Соотношение (4.2) носит название условия нормировки. Функции, удовлетворяющие этому условию, называются нормированными.

Из (4.1) следует, что квадрат модуля волновой функции дает плотность вероятности (вероятность, отнесенную к единице объема) нахождения частицы в соответствующем месте пространства.

В соответствии со своим смыслом волновая функция должна быть однозначной, непрерывной и конечной. Кроме того, она должна иметь непрерывную и конечную

производную. Совокупность перечисленных требований носит название стандартных условий.

Волновая функция удовлетворяет принципу суперпозиции: если система может находиться в различных состояниях, описываемых волновыми функциями  $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n$ , то она также может находиться в состоянии  $\psi$ , описываемом линейной комбинацией этих функций:

$$\psi = \sum_n C_n \cdot \psi_n,$$

где  $C_n$  ( $n=1, 2, \dots$ ) – произвольные, вообще говоря, комплексные числа. Сложение волновых функций, а не вероятностей, принципиально отличает квантовую теорию от классической статистической теории, в которой для независимых событий справедлива теорема сложения вероятностей.

Из физического смысла волновой функции вытекает, что квантовая механика имеет статический характер. Она не позволяет определить местонахождение частицы в пространстве или траекторию, по которой движется частица. С помощью волновой функции можно лишь предсказать, с какой вероятностью частица может быть обнаружена в различных точках пространства. На первый взгляд может показаться, что квантовая механика дает значительно менее точное описание движения частицы, чем классическая механика, которая «точно» определяет местоположение и скорость частицы в каждый момент времени. Однако в действительности это не так. Квантовая механика гораздо глубже вскрывает истинное поведение микрочастиц. Она лишь не определяет того, чего нет на самом деле.

## 5. УРАВНЕНИЕ ШРЁДИНГЕРА

В основе нерелятивистской квантовой механики лежит уравнение Шрёдингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + U\psi = i\hbar\frac{d\psi}{dt}, \quad (5.1)$$

где  $m$  – масса частицы;  $i$  – мнимая единица;  $U$  – потенциальная энергия частицы;  $\Delta$  – оператор Лапласа, результат действия которого на некоторую функцию представляет собой сумму вторых частных производных по координатам. В нашем случае:

$$\Delta\psi = \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}. \quad (5.2)$$

Уравнение (5.1) позволяет найти волновые функции частиц. Из этого уравнения следует, что вид волновой функции определяется функцией  $U$ , т.е. в конечном счёте характером сил, действующих на частицу.

Уравнение Шрёдингера является основным уравнением нерелятивистской квантовой механики. Оно не может быть выведено из других соотношений. Его следует рассматривать как исходное основное предположение, справедливость которого доказывается тем, что все вытекающие из него следствия самым точным образом согласуются с опытными фактами.

Если силовое поле, в котором движется частица, стационарно, то функция  $U$  не зависит явно от времени  $t$ . В этом случае решение уравнения Шрёдингера распадается на два множителя, один из которых зависит только от координат, другой – только от времени:

$$\psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z) \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t}. \quad (5.3)$$

Здесь  $E$  – полная энергия частицы, которая в случае стационарного поля остается постоянной. Чтобы убедиться

в справедливости (5.3), подставим его в (5.1). В результате получим:

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

Сократив на общий множитель  $e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$ , будем иметь:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi + U \cdot \psi = E \cdot \psi. \quad (5.4)$$

Перепишем последнее уравнение в виде

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U)\psi = 0. \quad (5.5)$$

Уравнение (5.4) называется уравнением Шрёдингера для стационарных состояний. В дальнейшем мы будем иметь дело только с этим уравнением, в случае стационарного силового поля волновая функция имеет вид (5.3). Соответственно

$$\psi^* \cdot \psi = e^{i\frac{E}{\hbar}t} \cdot \psi^* \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \cdot \psi = \psi^* \cdot \psi,$$

так что плотность вероятности равна  $\psi^* \cdot \psi$  и, следовательно, от времени не зависит. По этой причине состояния, описываемые волновыми функциями вида (5.3), были названы стационарными.

## 6. ПРИНЦИП ПРИЧИННОСТИ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

В классической механике состояния частицы (материальной точки) определяются заданием положения и скорости (или импульса) частицы. Если известно состояние в начальный момент времени и силовое поле, в котором находится частица, то, решив уравнение Ньютона, можно найти положение и скорость частицы в любой последую-

щий момент времени. В этом состоит сущность причинности в классической механике.

В квантовой механике классическое понятие состояния лишено смысла, ибо координата и скорость частицы принципиально не могут иметь одновременно определенных значений. Соответственно классическое понятие причинности также неприемлемо в квантовой теории. Состояние частицы задается в квантовой механике волновой функцией. Если известны волновая функция в начальный момент времени и силовое поле, в котором движется частица, то, решив уравнение Шрёдингера, можно найти волновую функцию в последующие моменты времени. В этом заключается сущность принципа причинности в квантовой механике. Таким образом, квантовая механика не отменила принцип причинности. Она лишь придала ему форму, соответствующую истинной природе вещей.

## 7. ДВИЖЕНИЕ СВОБОДНОЙ ЧАСТИЦЫ

Пусть вдоль оси  $X$  движется свободная частица, т.е. частица, на которую не действуют силы. В этом случае потенциальную энергию частицы можно считать равной нулю. Тогда уравнение (5.4) для стационарных состояний примет вид:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \cdot E \psi = 0, \quad (7.1)$$

где  $E$  – полная энергия, равная кинетической энергии частицы, т.е.:

$$E = \frac{p^2}{2m}.$$

С учётом (2.1) последнее выражение преобразуется к виду:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot k^2, \quad (7.2)$$

где  $k = \frac{2\pi}{\lambda}$  – волновой вектор частицы.

Решением уравнения (7.1) является плоская бегущая волна:

$$\psi = A \cdot e^{ikx}, \quad (7.3)$$

где  $A$  – амплитуда волны.

Квадрат модуля этой волновой функции определяет вероятность обнаружения частицы в той или иной области оси  $X$ . Как видно из (7.3), для свободной частицы эта вероятность не зависит от ее координаты, так как

$$|\psi|^2 = \psi\psi^* = A^2.$$

Это означает, что для свободной частицы все точки пространства эквивалентны и вероятность нахождения её в любой из них одинакова (рис. 7.1б).

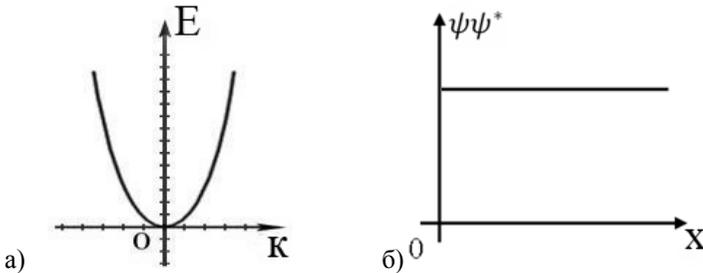


Рис. 7.1

Из выражения (7.2) видно, что зависимость энергии от импульса (квадратичная парабола) оказывается обычной для нерелятивистских частиц. Следовательно, энергия свободной частицы может принимать любое значение (т.к. волновое число  $k$  может принимать любые положительные значения), т. е. ее энергетический спектр является непрерывным.

## 8. ТУННЕЛЬНЫЙ ЭФФЕКТ

Перейдем к более сложным случаям движения частицы (массы  $m_0$ ) в постоянном во времени силовом поле.

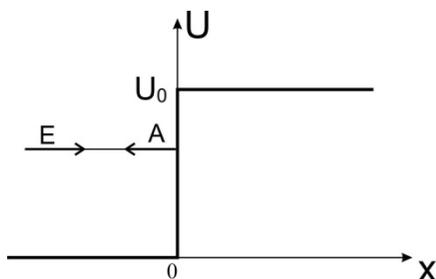


Рис. 8.1

Рассмотрим сначала случай одномерного движения частицы вдоль оси  $x$ , когда потенциальная энергия  $U$  меняется скачком в одной точке  $x = 0$ . При  $x < 0$   $U = 0$ , а при  $x > 0$  она равна постоянному значению  $U_0$  (рис. 8.1).

График зависимости потенциальной энергии от координаты  $x$  (потенциальная кривая) имеет вид ступеньки высотой  $U_0$  и называется потенциальной стенкой. Вдоль осей  $y$  и  $z$  потенциальная энергия не меняется. Классическая картина движения в этом поле такова: если полная энергия частицы  $E < U_0$ , то частица, движущаяся слева направо, достигнет потенциальной стенки (в точке  $A$ ) и отразится от неё. Проникнуть в область  $x > 0$  частица не может, так как при этом её полная энергия  $E = \frac{p^2}{2m_0} + U$

(которая в силу закона сохранения энергии остается неизменной) оказалась бы меньше потенциальной, так что импульс  $p = \sqrt{2m_0(E - U_0)}$  стал бы чисто мнимым. Потенциальная стенка подобна абсолютно твёрдой стенке.

В квантовой механике нахождение частицы внутри области  $E < U$  не приводит к бессмысленному выводу об отрицательной кинетической энергии. Кинетическая и потенциальная энергия, согласно соотношению неопределенностей, не имеют одновременно точных значений, так как кинетическая энергия зависит от импульса, а потенциальная – от координаты. Поэтому равенство

$$E = \frac{p^2}{2m_0} + U$$

имеет в квантовой механике лишь тот смысл,

что в любом состоянии средняя полная энергия равна сумме средней кинетической и средней потенциальной энергии.

Согласно квантовой механике, волновая функция частицы, движущейся к стенке с импульсом  $p = \sqrt{2m_0E}$ , представляет собой в этой области плоскую волну де Бройля. При  $x > 0$  полная энергия та же, что и при  $x < 0$ , но теперь в выражении для плоской волны вместо  $p = \sqrt{2m_0E}$  должна стоять величина  $\sqrt{2m_0(E - U_0)} = i\sqrt{2m_0(U_0 - E)}$ . Эту величину уже нельзя истолковать как импульс частицы. Зависимость волновой функции от времени при  $x < 0$  и при  $x > 0$  одна и та же, но зависимость от координат при  $x > 0$  становится аперiodической:

$$\psi(x) \sim e^{-\left[\frac{\sqrt{2m_0(U_0 - E)}}{\hbar}\right] \cdot x} \quad (8.1)$$

Волновая функция при  $x > 0$  экспоненциально убывает с ростом  $x$  (рис. 8.2).



Рис. 8.2

В пространстве перед потенциальной стенкой наряду с падающей волной существует и отражённая волна. При этом волновые функции перед стенкой ( $x < 0$ ) и внутри неё ( $x > 0$ ) связаны друг с другом. В точке  $x = 0$  значения волновых функций и их производных по координате должны совпадать вследствие непрерывности волновой функции и её первой производной. Согласно (8.1), имеется конечная вероятность обнаружить частицу в классически запрещенной области  $x > 0$ . Эта вероятность экспоненциально убывает с увеличением координаты  $x$ . Убывание происходит тем быстрее, чем значительно потенциальная энергия  $U_0$  превышает полную энергию частицы  $E$ . Вероятность обнаружить частицу на расстояниях, много больших длины волны де Бройля, мала.

Возможность проникновения частицы в классически запрещенную область дает ключ к пониманию многих процессов, существование которых, с точки зрения классической механики, необъяснимо.

Рассмотрим следующую задачу. Допустим, имеется узкая область шириной  $d$ , внутри которой потенциальная энергия равна  $U_0$ . Вне этой области потенциальная энергия равна нулю. Потенциальная кривая имеет вид

барьера прямоугольной формы (рис. 8.3), называемого потенциальным барьером.

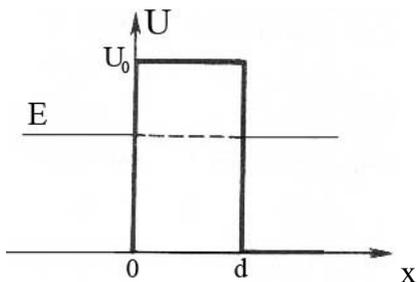


Рис 8.3

Частица с энергией  $E < U_0$ , движущаяся слева направо, согласно классической механике, не может преодолеть этот барьер и отражается от него. В квантовой механике экспоненциально убывающая волновая функция не успевает полностью затухнуть внутри барьера, и отлична от нуля в области за барьером. Это приводит к тому, что существует небольшая вероятность обнаружить частицу за барьером. Волновая функция при  $x > d$  также представляет собой волну де Бройля той же частоты (т.к. энергия частицы остается прежней), но с гораздо меньшей амплитудой, чем перед барьером (рис 8.4).

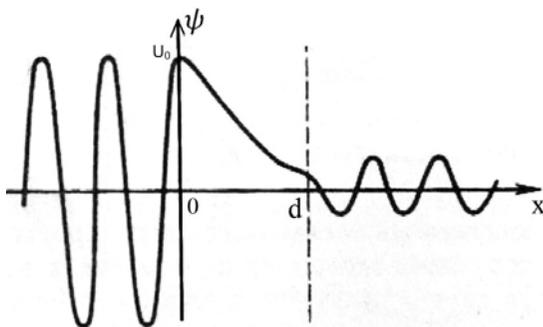


Рис. 8.4

Возникает интереснейшее явление – проникновение частиц сквозь потенциальный барьер, называемое *туннельным эффектом*.

Вероятность обнаружения частицы в точке  $x$  пропорциональна квадрату модуля волновой функции  $|\psi|^2$ . Поэтому отношение вероятности найти частицу за барьером в точке  $x=d$  к вероятности обнаружения её перед барьером в точке  $x=0$ , согласно (8.1), равно:

$$D \approx \frac{|\psi|_d|^2}{|\psi|_0|^2} \approx e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m_0(U_0-E)}d} \quad (8.2)$$

Это отношение – вероятность «просачивания» частицы сквозь барьер – называется коэффициентом прозрачности потенциального барьера.

Главная особенность формулы (8.2) состоит в том, что очень малая по сравнению с  $\sqrt{2m_0(U_0-E)} \cdot d$  величина – постоянная Планка  $\hbar$  – стоит в знаменателе экспоненты. Вследствие этого коэффициент прозрачности  $D$  для классической частицы большой массы чрезвычайно мал. Чем меньше масса частицы, тем больше вероятность туннельного эффекта. Так, при высоте барьера 2 эВ и ширине  $10^{-10}$  м вероятность прохождения сквозь барьер для электрона с энергией 1 эВ равна 0,78, а для протона с той же энергией – лишь  $3,6 \cdot 10^{-19}$ . Если же взять макроскопическое тело – шарик массой 1 г, движущийся по горизонтальной поверхности с очень малой скоростью (кинетическая энергия близка к нулю), то вероятность преодоления им препятствия – лезвия бритвы толщиной 0,1 мм, выступающей над горизонтальной поверхностью на 0,1 мм, равна  $10^{-26}$ .

Из выражения (8.2) также следует, что  $D$  зависит от ширины барьера  $d$  и от  $(U_0 - E)$ .

Для потенциального барьера произвольной формы (рис. 8.5), удовлетворяющей условиям так называемого классического приближения (достаточно гладкая форма кривой), будем иметь:

$$D \approx e^{-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m_0(U_0 - E)} dx}$$

где  $U = U(x)$ .

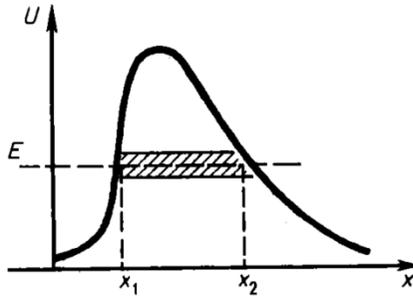


Рис. 8.5

Прохождение частицы сквозь область, в которую, согласно законам классической механики, она не может проникнуть, можно пояснить с помощью соотношения неопределенностей. Неопределенность импульса  $\Delta p$  на отрезке  $\Delta x$ , равном ширине барьера  $d$ , составляет:  $\Delta p > \frac{\hbar}{d}$ .

Связанная с этим разбросом в значениях импульса кинетическая энергия  $\Delta p^2/2m_0$  может оказаться достаточной для того, чтобы полная энергия частицы оказалась больше потенциальной.

Туннельный эффект позволяет объяснить ряд явлений, необъяснимых с точки зрения классической механики. Так, он позволяет объяснить явление  $\alpha$ -распада, при котором из радиоактивных ядер вылетают  $\alpha$ -частицы (ядра атома гелия). Известно, что  $\alpha$ -частица прочно удержи-

вается внутри ядра ядерными силами. Вне ядра на  $\alpha$ -частицу действуют электростатические силы отталкивания. Потенциальная энергия в зависимости от расстояния до центра ядра имеет вид, изображенный на рис. 8.6

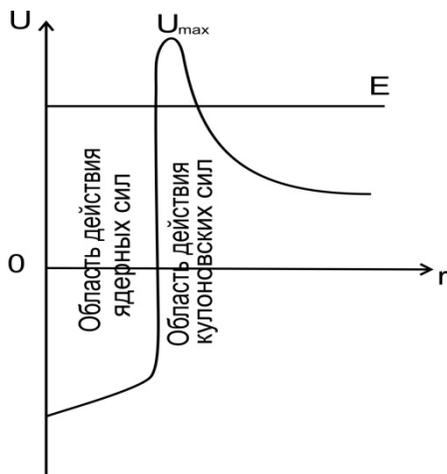


Рис. 8.6

Внутри этой ямы  $\alpha$ -частица имеет энергию  $E \sim 6$  МэВ, которая много меньше высоты барьера  $U_{max}$ . Для тяжёлых элементов  $U_{max} \sim 25$  МэВ. Несмотря на значительную высоту барьера, имеется отличная от нуля вероятность прохождения частицы сквозь барьер. В результате среднее время жизни ядра оказывается конечным.

Благодаря туннельному эффекту положительно заряженные ядра атомов могут сблизиться до расстояния  $10^{-14} - 10^{-15}$  м (преодолеть барьер кулоновского отталкивания) при кинетических энергиях, меньших высоты потенциального барьера. Это оказывает большое влияние на протекание термоядерных реакций — они происходят при гораздо меньших температурах, чем это следует из классической физики.

Прохождением частиц сквозь потенциальный барьер объясняются ионизация атомов в сильном электрическом поле, вырывание электронов из металла под действием электрического поля (автоэлектронная эмиссия) и многие другие явления.

## 9. ЧАСТИЦА В ОДНОМЕРНОЙ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЯМЕ С БЕСКОНЕЧНО ВЫСОКИМИ СТЕНКАМИ

При свободном движении, а также во всех случаях, когда частица может уходить в далёкие области пространства, где отсутствуют силы, энергия частицы может принимать любые значения, т.е. энергетический спектр частицы является непрерывным. Если же силовое поле таково, что движение частицы ограничено определенной конечной областью пространства (размеры системы конечны), то, согласно квантовой механике, энергетический спектр является дискретным.

На простом примере проследим, как возникают дискретные значения и как их можно определить теоретически. Пусть частица, например электрон, находится в потенциальной яме шириной  $\ell$  с бесконечно высокими стенками:  $U = 0$  при  $0 \leq x \leq \ell$ ,  $U = \infty$  при  $x > \ell$  и  $x < 0$ . Ограничимся случаем одномерного движения частицы вдоль оси  $x$  (рис 9.1).

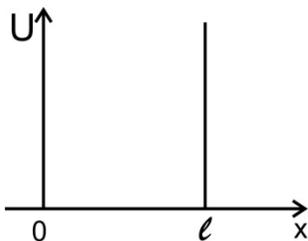


Рис. 9.1

Форму прямоугольной ямы имеет, например, график потенциальной энергии электрона в металлической пластине. Глубина ямы определяется работой выхода электрона из металла. Яма с бесконечно высокими стенками соответствует металлу (конечно, не существующему в природе) с бесконечно большой работой выхода.

Если бы была справедлива классическая механика, то электрон двигался бы от стенки к стенке с неизменной энергией и постоянным по величине импульсом.

При каждом столкновении со стенкой направление импульса менялось бы на противоположное. Энергия электрона могла бы принимать любые значения в зависимости от сообщенного электрону начального импульса. В частности, эта энергия могла бы быть нулевой, и частица в этом случае покоилась бы на дне ямы (положение устойчивого равновесия в классической механике).

Чтобы определить поведение электрона с точки зрения квантовой механики, надо записать для области  $0 \leq x \leq \ell$  уравнение Шрёдингера и решить его с учетом граничных условий.

Вне ямы волновая функция равна нулю, так как показатель экспоненты в выражении (8.1) бесконечно велик ( $U = \infty$ ). Из-за бесконечной высоты потенциальной стенки вероятность проникновения внутрь нее равна нулю. Следовательно, на границах ямы волновая функция должна обращаться в нуль:

$$\psi(0) = \psi(\ell) = 0. \quad (9.1)$$

Это и есть условие, которому должны удовлетворять решения уравнения Шрёдингера, которое для области ямы, согласно (5.5), может быть записано в виде

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \cdot E\psi = 0. \quad (9.2)$$

В этой области  $U = 0$ . Введя обозначение

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar} \cdot E, \quad (9.3)$$

придем к уравнению хорошо известному из теории колебаний:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0. \quad (9.4)$$

Решение такого уравнения имеет вид

$$\psi(x) = A \cdot \sin(kx + \alpha) \quad (9.5)$$

(здесь удобнее взять синус вместо косинуса).

Условиям (9.1) можно удовлетворить следующим выбором постоянных  $k$  и  $\alpha$ . Прежде всего из условия  $\psi(0) = 0$  получаем

$$\psi(0) = A \cdot \sin \alpha = 0,$$

откуда следует, что  $\alpha$  должна быть равна нулю. Далее должно выполняться условие:

$$\psi(\ell) = A \cdot \sin k\ell,$$

что возможно лишь в случае, если

$$k\ell = \pm\pi n \quad (n=1, 2, 3, \dots) \quad (9.6)$$

( $n = 0$  отпадает, т.к. при этом  $\psi = 0$  – частица нигде не находится). Исключив  $k$  из уравнений (9.3) и (9.6), найдем собственные значения энергии частицы:

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_0 \ell^2} \cdot n^2. \quad (9.7)$$

Спектр энергии оказался дискретным. На рис. 9.2 изображена схема энергетических уровней.

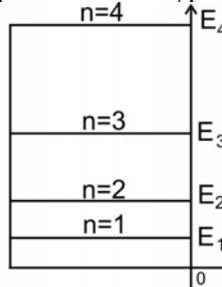


Рис. 9.2

Оценим расстояние между соседними уровнями для различных значений массы частицы  $m$  и ширины ямы  $\ell$ . Разность энергий двух соседних уровней равна

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_0 \ell^2} \cdot (2n+1) \approx \frac{\pi^2 \hbar^2}{m_0 \ell^2} \cdot n. \quad (9.8)$$

Если взять  $m_0$  порядка массы молекулы ( $\sim 10^{-26}$  кг), а  $\ell$  порядка 0,1 м (размеры сосуда, в котором находится газ), получится:

$$\Delta E_n = \frac{3,14^2 \cdot 1,05^2 \cdot 10^{-68}}{10^{-26} \cdot 0,1^2} \cdot n = 10^{-39} n \text{ Дж} \approx 10^{-20} n \text{ эВ}.$$

Столь густо расположенные уровни будут практически восприниматься как сплошной спектр энергии, так что хотя квантование энергии в принципе будет иметь место, но на характере движения молекул сказываться не будет.

Аналогичный результат получается, если взять  $m_0$  порядка массы электрона ( $\sim 10^{-30}$  кг) при тех же размерах ямы (свободные электроны в металле). В этом случае

$$\Delta E_n \approx 10^{-35} n \text{ Дж}.$$

Однако совсем иной результат получается для электрона, если область, в пределах которой он движется, будет порядка атомных размеров ( $\sim 10^{-10}$  м). В этом случае подстановка в формулу (9.8) числовых значений даёт:

$$\Delta E_n \approx 10^{-17} n \text{ Дж} \approx 10^2 n \text{ эВ}.$$

Существенно, что электрон в потенциальной яме не может иметь энергию ниже минимальной энергии, равной

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2 m_0 \ell^2}.$$

Наличие минимальной энергии, отличной от нуля, неслучайно и вытекает из соотношения неопределённости. Неопределённость координаты  $\Delta X$  электрона в яме шириной  $\ell$  равна  $\Delta X = \ell$ , поэтому согласно соотношению

неопределенностей, импульс не может иметь точное, в данном случае нулевое значение. Неопределенность импульса составляет  $\Delta P \sim \frac{\hbar}{\ell}$ . Такому разбросу значений импульса соответствует кинетическая энергия  $E_{\min} \sim \frac{(\Delta p)^2}{2m_0} \sim \frac{\hbar^2}{2m_0 \ell^2}$ , которая с точностью до множителя  $\pi^2$  совпадает с выражением (9.7) для  $n = 1$ . Все остальные уровни ( $n > 1$ ) имеют энергию, превышающую это минимальное значение.

Подставив в (9.5) значение  $k$ , получающееся из условия (9.6), найдем собственные функции задачи:

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

Для нахождения коэффициента  $A$  воспользуемся условием нормировки (4.2), которое в данном случае запишется следующим образом:

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

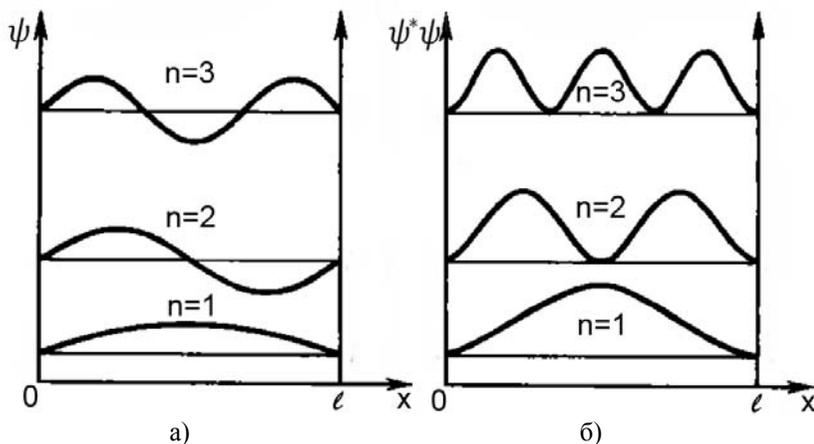


Рис. 9.3

На концах промежутка интегрирования подынтегральная функция обращается в нуль. Поэтому значение интеграла можно получить, умножив среднее значение

$\sin^2 \frac{n\pi x}{\ell}$  (равное, как известно,  $1/2$ ), на длину

промежутка  $\ell$ . В результате получится:  $A^2 \frac{1}{2} \ell = 1$ , откуда

$A = \sqrt{\frac{2}{\ell}}$ . Таким образом, собственные функции имеют вид:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{\ell}} \cdot \sin \frac{n\pi x}{\ell} \quad (n = 1, 2, 3, \dots). \quad (9.9)$$

Графики собственных функций изображены на рис. 9.3 а. На рис. 9.3 б дана плотность вероятности обнаружения частицы на различных расстояниях от стенок ямы, равная  $\psi^* \psi$ . Из рис. 9.3 б, в частности, следует, что в состоянии с  $n = 2$  частица не может быть обнаружена в середине ямы, и вместе с тем одинаково часто бывает как в левой, так и в правой половинах ямы. Такое поведение частицы, очевидно, несовместимо с представлением о траекториях. Отметим, что согласно классическим представлениям все положения частицы в яме равновероятны.

Реальные потенциальные ямы, разумеется, не имеют бесконечно высоких стенок, и частицы, приобретя достаточную энергию, могут покинуть их. Например, как уже отмечено, электроны в металле находятся в своеобразной потенциальной яме, но если этим электронам передать достаточную энергию фотонов ультрафиолетового света, то электроны могут вылетать из металла, что и происходит в фотоэффекте.

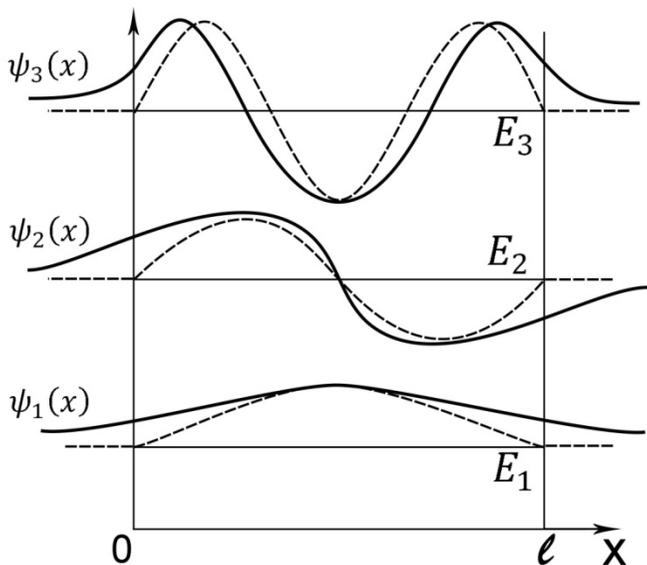


Рис. 9.4

Для потенциальных ям разных типов получаются разные значения дозволённых энергий и «расстояний» между ними. Если стенки ямы не являются непроницаемыми (именно так обстоит дело в случае любого реального потенциала), то волновая функция не должна обращаться в нуль на стенках ямы, т.е. может происходить некоторая «утечка» волновой функции за пределы ямы. При этом в яме по-прежнему существуют стоячие волны и значения энергии (которые, конечно, меньше той минимальной энергии, с которой частица может покинуть яму) по-прежнему дискретны. Первые три значения энергии и соответствующие им волновые функции (стоячие волны) для случая одномерного ящика с проницаемыми (т.е. не бесконечно высокими) стенками показаны на рис. 9.4.

## 10. ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР

Гармоническим осциллятором называется система, в которой совершаются гармонические колебания с определенной собственной частотой  $\omega_0$ . Груз на пружине или маятник – примеры классических гармонических осцилляторов. Колебания в подобных системах вызываются квазиупругой силой  $F_x = -kx$ . В случае колебаний груза на пружине  $k$  – жесткость пружины, а  $x$  – смещение тела или частицы от положения равновесия. Собственная частота колебаний такого осциллятора  $\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}$ , где  $m$  – масса частицы. Потенциальная энергия гармонически колеблющейся частицы

$$U = \frac{kx^2}{2} = \frac{m\omega^2 x^2}{2}. \quad (10.1)$$

Потенциальная яма в этом случае является параболической (сплошная кривая на рис. 10.1)

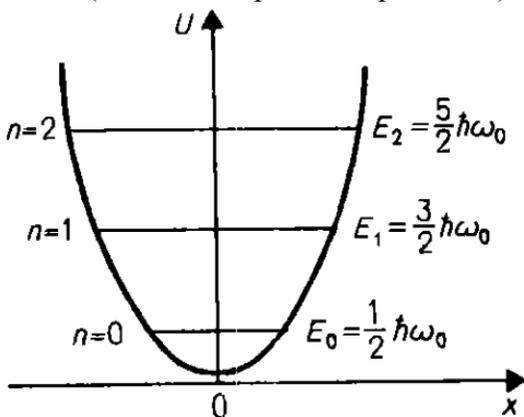


Рис. 10.1

В рассматриваемом нами одномерном случае  $\Delta\psi = \frac{d^2\psi}{dx^2}$ . С учетом этого и соотношения (10.1) уравнение Шредингера (5.5), описывающее поведение гармонического осциллятора в квантовой механике, выглядит следующим образом:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E - \frac{m\omega_0^2 x^2}{2} \right) \cdot \psi = 0. \quad (10.2)$$

Движение частицы в параболической яме во многом напоминает ее движение в прямоугольной яме с бесконечными стенками. Энергия также принимает дискретные значения и по-прежнему каждому значению энергии  $E_n$  соответствует стоячая волна  $\psi_n$ . Но теперь возможные значения энергии будут иными: волновые функции не имеют синусоидальной формы и не обращаются в нуль на границах ямы.

Тогда каким образом возникает квантование энергии в осцилляторе, если в этом случае система не имеет определенных границ, на которых волновая функция обращалась бы в нуль (как для электрона в прямоугольной яме с бесконечно высокими стенками)? Оказывается, что при движении частицы в яме с наклонными стенками роль граничных условий выполняет требование, чтобы волновая функция достаточно быстро стремилась к нулю на бесконечности ( $\psi \rightarrow 0$  при  $x \rightarrow \pm\infty$ ).

В классически недостижимой области  $E < U$  волновые функции быстро затухают. Частица может проникать на малое расстояние (порядка длины волны де Бройля частицы) сквозь наклонные стенки потенциальной ямы.

Волновые функции, соответствующие низшим уровням энергии  $E_0, E_1, E_2$ , изображены на рис. 10.2 а, б, в.

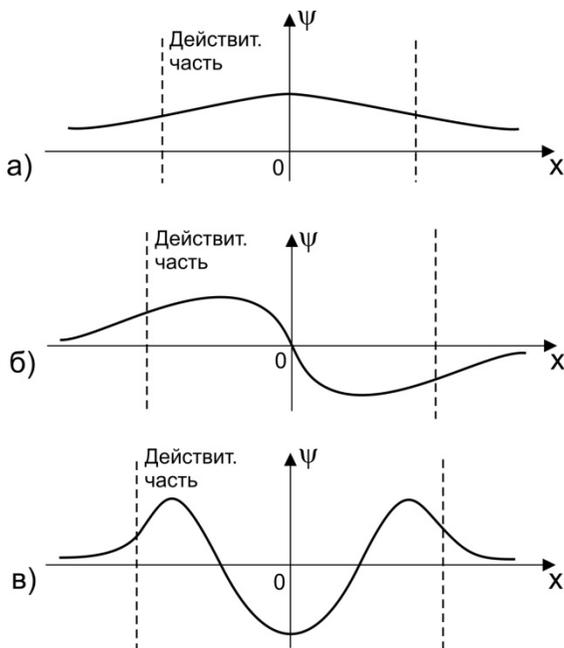


Рис. 10.2

Пунктиром показаны границы классически недостижимых областей. Зависимость  $\psi_n$  от  $X$  имеет более сложную форму, чем в случае прямоугольной ямы с бесконечно высокими стенками. Эту зависимость можно найти, решив уравнение Шрёдингера (10.2).

В теории дифференциальных уравнений доказывается, что уравнение (10.2) имеет конечные, однозначные и непрерывные решения при значениях параметра  $E$ , равных

$$E_n = \left( n + \frac{1}{2} \right) \cdot \hbar \omega \quad (n = 0, 1, 2). \quad (10.3)$$

На рис. 10.1 дана схема энергетических уровней гармонического осциллятора. Для наглядности уровни вписаны в кривую потенциальной энергии. Как видно из рис. 10.1, эти уровни являются эквидистантными, т.е.

отстоящими друг от друга на одинаковое расстояние. Наименьшее возможное значение энергии равно

$$E_0 = \frac{1}{2} \cdot \hbar \omega . \quad (10.4)$$

Это значение называется *нулевой энергией*.

Существование нулевой энергии, как и в случае прямоугольной ямы, вытекает из принципа неопределенности. Классическое выражение для полной энергии гармонического осциллятора имеет вид:

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} . \quad (10.5)$$

Поскольку  $p$  и  $X$  квантового осциллятора не могут принимать нулевого значения, оценим величину минимальной энергии квантового гармонического осциллятора с помощью соотношения неопределенностей. Среднее значение координаты  $X$  равно нулю, поэтому в качестве неопределенности координаты  $\Delta x$  можно принять классическую амплитуду колебаний  $A$ . Аналогично можно положить  $\Delta p$  равным  $p$ . Тогда соотношение неопределённостей примет вид

$$p \cdot A \geq \hbar^2 , \text{ откуда } p \geq \frac{\hbar^2}{A} .$$

(знак  $\geq$  означает «по порядку величины больше»).

Средние значения кинетической и потенциальной энергии одинаковы. Поэтому в качестве полной энергии можно взять удвоенное значение кинетической энергии:

$$E = 2E_k = \frac{p^2}{m} \approx \frac{\hbar^2}{m A^2} . \quad (10.6)$$

Вместе с тем полная энергия равна максимальному значению потенциальной энергии:

$$E = U_{\max} = \frac{m\omega^2 A^2}{2} . \quad (10.7)$$

Перемножив (10.6) и (10.7), получим:

$$E^2 \approx \frac{\hbar^2 \omega^2}{2}, \text{ т.е. } E \approx \hbar \omega. \quad (10.8)$$

Полученное значение с точностью до числового множителя порядка единицы совпадает с нулевой энергией осциллятора.

Существование нулевой энергии подтверждается экспериментами по изучению рассеяния света при низких температурах. Оказывается, что интенсивность рассеянного света по мере понижения температуры стремится не к нулю, а к некоторому конечному значению, указывающему на то, что при абсолютном нуле колебания атомов в кристаллической решетке не прекращаются.

Из-за малости  $\hbar^2$  минимальная энергия макроскопических осцилляторов, таких как груз на пружинке или маятник, пренебрежимо мала. При частотах колебаний в десятки герц эта энергия составляет около  $10^{-33}$  Дж и обнаружить ее практически невозможно. На столь же малые значения отличаются друг от друга соседние уровни энергии классического осциллятора. Поэтому его энергию можно считать непрерывной.

Квантовая механика позволяет вычислять вероятность различных переходов квантовой системы из одного состояния в другое. Подобные вычисления показывают, что для гармонического осциллятора возможны лишь переходы между соседними уровнями, т.е. квантовое число  $n$  в формуле (10.3) может изменяться лишь на единицу:

$$\Delta n = \pm 1. \quad (10.9)$$

Из (10.9) вытекает, что энергия гармонического осциллятора может изменяться только порциями  $\hbar \omega$ . Этот результат совпадает с тем чужеродным для классической физики предположением, которое пришлось сделать Планку, чтобы вычислить испускательную способность абсолютно черного тела.

## 11. КВАНТОВАНИЕ МОМЕНТА ИМПУЛЬСА

В квантовой механике большую роль играет понятие оператора. Под оператором подразумевается правило, посредством которого одной функции (скажем  $\varphi$ ) сопоставляется другая функция (обозначим ее  $f$ ). Символически это записывается так:

$$f = \hat{Q}\varphi, \quad (11.1)$$

где  $\hat{Q}$  – символическое обозначение оператора. В формуле (5.2) роль  $\hat{Q}$  играет  $\Delta$ , роль  $\varphi$  – функция  $\psi$ , а роль  $f$  – правая часть формулы.

Под символом оператора скрывается совокупность действий, с помощью которых исходная функция ( $\varphi$ ) превращается в другую функцию ( $f$ ). Например, под символом  $\Delta$  скрывается двукратное дифференцирование по всем трем координатам  $x$ ,  $y$ ,  $z$  с последующим суммированием полученных выражений. Оператор может, в частности, представлять собой умножение исходной функции  $\varphi$  на некоторую функцию  $U$ . Тогда  $f = \hat{U}\varphi = U\varphi$  и, следовательно,  $\hat{U} = U$ . Если рассматривать функцию  $U$  в уравнении (5.5) как оператор, действие которого на пси-функцию сводится к умножению  $\varphi$  на  $U$ , то уравнению (5.5) можно придать вид:

$$\hat{H}\psi = E\psi. \quad (11.2)$$

В этом уравнении символом  $\hat{H}$  обозначен оператор, равный сумме операторов  $-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$  и  $U$ :

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U. \quad (11.3)$$

Оператор  $\hat{H}$  называют гамильтонианом. Гамильтониан является оператором энергии  $E$ . В квантовой механике другим динамическим переменным также сопоставляют операторы. Соответственно рассматриваются операторы координат, импульса, момента импульса и т.д. Для каждой динамической переменной  $q$  составляется уравнение, аналогичное (11.2). Оно имеет вид:

$$\hat{Q}\psi = q\psi . \quad (11.4)$$

Решая это уравнение, находят собственные значения  $q_1, q_2, \dots$  оператора  $\hat{Q}$ . Согласно одному из постулатов квантовой механики, при измерениях физической величины  $q$ , представляемой оператором  $\hat{Q}$ , могут получаться только результаты, совпадающие с собственными значениями этого оператора.

Возможны состояния, для которых при измерениях некоторой величины  $q$  всегда получается одно и то же значение  $q_n$ . О таких состояниях говорят как о состояниях, в которых величина  $q$  имеет определенное значение. Однако возможны также состояния, для которых при измерениях получаются с разной вероятностью различные собственные значения оператора  $\hat{Q}$ . О таких состояниях говорят как о состояниях, в которых величина  $q$  не имеет определенного значения.

Применительно к моменту импульса в квантовой механике вводят четыре оператора: оператор квадрата момента импульса  $\hat{L}^2$  и три оператора проекций момента импульса на оси координат –  $\hat{L}_x$ ,  $\hat{L}_y$  и  $\hat{L}_z$ . Оказывается, что одновременно могут иметь определенные значения лишь квадрат момента и одна из проекций момента на координатные оси. Две другие проекции при этом оказываются совершенно неопределенными. Это означает, что «вектор» момента импульса не имеет определенного

направления и, следовательно, не может быть изображен, как в классической механике, с помощью направленного отрезка прямой.

Решение уравнения  $\hat{L}^2\Psi = L^2\Psi$  является трудным. Поэтому мы ограничимся приведением конечных результатов: собственные значения оператора квадрата момента импульса равны

$$L^2 = \ell(\ell+1)\hbar^2, \quad (\ell = 0, 1, 2, \dots), \quad (11.5)$$

где  $\ell$  – азимутальное квантовое число.

Следовательно, модуль момента импульса может иметь лишь дискретные значения, определяемые формулой

$$L = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1)}, \quad (\ell = 0, 1, 2, \dots). \quad (11.6)$$

Вид оператора  $\hat{L}_z$  довольно прост. Тем не менее мы приведём только результат. Из решения следует, что оператор  $\hat{L}_z$  обладает дискретным спектром:

$$L_z = m\hbar, \quad (m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots), \quad (11.7)$$

где  $m$  – магнитное квантовое число.

Поскольку проекция вектора не может превзойти модуль, то должно выполняться условие  $|m\hbar| \leq \hbar\sqrt{\ell(\ell+1)}$ . Отсюда следует, что максимально возможное значение  $|m|$  равно  $\ell$ .

Из сопоставления (11.7) и (11.6) вытекает, что  $|L_z|$  всегда меньше  $L$ . Следовательно, направление момента импульса не может совпадать с выделенным в пространстве направлением. Это согласуется с тем обстоятельством, что направление момента импульса в пространстве является неопределённым.

Подчеркнем, что отличные от (11.6) и (11.7) значения  $L$  и  $L_z$  не могут наблюдаться ни при каких обстоятельствах. Следовательно, моменты импульса макроскопических тел также подчиняются правилам (11.6), (11.7). Правда,

вследствие малости  $\hbar$  дискретность моментов макроскопических тел практически не обнаруживается, подобно тому, как вследствие малости элементарного заряда  $e$  не обнаруживается дискретность макроскопических электрических зарядов.

Отметим, что из правил квантования момента импульса вытекает, что постоянную Планка  $\hbar$  можно рассматривать как естественную единицу момента импульса.

Момент импульса системы, состоящий из нескольких микрочастиц, равен сумме моментов отдельных частиц. Суммарный момент, как и всякий момент вообще, определяется выражением

$$L = \hbar\sqrt{L(L+1)}, \quad (11.8)$$

где  $L$  – азимутальное квантовое число результирующего момента. В случае системы, состоящей из двух частиц, число  $L$  может иметь значения

$$L = \ell_1 + \ell_2, \quad \ell_1 + \ell_2 - 1, \dots, |\ell_1 - \ell_2|, \quad (11.9)$$

где  $\ell_1$  и  $\ell_2$  – числа, определяющие модули складываемых моментов по формуле  $L_i = \hbar\sqrt{\ell_i(\ell_i + 1)}$ .

Нетрудно сообразить, что результирующий момент может иметь  $2\ell_2 + 1$  или  $2\ell_1 + 1$  различных значений (нужно взять меньшее из двух  $\ell$ ).

В случае системы, состоящей из большего числа частиц, нужно сначала сложить моменты двух любых частиц. Затем полученный результат сложить с моментом третьей частицы и т.д. Очевидно, что максимальное значение квантового числа  $L$  равно сумме чисел  $\ell_i$  – отдельных частиц. Минимальное значение  $L$  в случае одинаковых частиц равно нулю при чётком числе частиц и равно  $\ell_i$  при нечётком числе частиц.

Проекция результирующего момента на некоторое направление  $Z$  определяется выражением

$$L_z = m_L \hbar \quad (m_L = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm L). \quad (11.10)$$

### Контрольные вопросы

1. В чем суть гипотезы де Бройля? Как зависит длина волны де Бройля от массы частицы?
2. Какая величина называется волновой функцией и как эта функция определяет вероятность того, что частица будет обнаружена в пределах объема  $dV$ ?
3. Перечислите условия, которым должна удовлетворять пси-функция. Напишите условие нормировки пси-функции.
4. Почему для микрочастиц неприменимо понятие траектории?
5. Напишите соотношение неопределенностей для энергии и времени. Что означает это соотношение?
6. Что такое туннельный эффект?
7. Может ли микрочастица с энергией равной или большей высоты потенциального барьера отразиться от барьера?
8. Приведите примеры туннельного эффекта. Сравните энергии частицы перед барьером и за ним.
9. Какую информацию о поведении частицы можно получить, решая уравнение Шрёдингера?
10. Сопоставьте классический и квантовый осцилляторы. Существует ли нулевая энергия у осциллятора – груз на пружинке? Квантуется ли энергия такого осциллятора?
11. Чему равны возможные энергии квантового гармонического осциллятора?
12. Как может меняться энергия квантового гармонического осциллятора?

## Примеры решения задач

1. Чему равна длина волны электрона с энергией 10 эВ?

Решение:

При столь низких энергиях можно без заметной ошибки пользоваться формулами классической механики:

$$E_k = \frac{p^2}{2m}, \text{ откуда: } p = \sqrt{2mE_k}.$$

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2mE_k}} = \frac{6,28 \cdot 1,05 \cdot 10^{-34}}{\sqrt{2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 10 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}}} = 3,86 \text{ \AA}.$$

2. Электронный пучок ускоряется в электронно-лучевой трубке разностью потенциалов  $U = 0,5$  кВ. Принимая, что неопределённость импульса равна 0,1% от его числового значения, определить неопределённость координаты электрона. Является ли в данных условиях электрон квантовой или классической частицей?

Решение:

Согласно соотношению неопределённостей:

$$\Delta x \cdot \Delta P_x \geq \hbar / 2, \quad (1)$$

где  $\Delta x$  – неопределённость координаты электрона;  $\hbar = 1,05 \cdot 10^{-34}$  Дж·с – постоянная Планка.

$$E_k = |e^-|U = 500 = 0,5 \text{ КэВ} \ll 0,511 \text{ МэВ} \quad (m_0 = 0,511 \text{ МэВ}),$$

т.е. электрон в данных условиях является нерелятивистской частицей. Поэтому импульс электрона

$$p = \sqrt{2mE_k} = \sqrt{2m|e^-|U} = 1,24 \cdot 10^{-23} \text{ кг} \cdot \text{ м/с}$$

Согласно условию

$$\Delta p = 0,001 \cdot p_x = 1,24 \cdot 10^{-23} \cdot 10^{-3} = 1,24 \cdot 10^{-26} \text{ кг} \cdot \text{ м/с}, \text{ т.е.}$$

$\Delta p_x \ll p_x$ , и электрон при данных условиях является классической частицей. Из (1) следует:

$$\Delta x = \frac{\hbar}{2\Delta p_x} = 26,7 \text{ нм.}$$

3. Частица массой  $m$  с энергией  $E$  налетает на прямоугольный бесконечный барьер с энергией  $U > E$  (рис. 1).

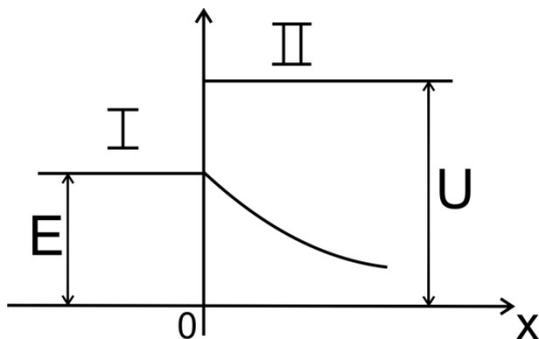


Рис. 1

Найти эффективную глубину проникновения частицы под барьер, т.е. в область  $x > 0$  ( $x_{эфф}$  – расстояние от границы барьера до точки, где плотность вероятности местонахождения частицы уменьшится в  $e$  раз).

Решение:

Из условия задачи 
$$\frac{|\psi_2|_0|^2}{|\psi_2|_{x_{эфф}}|^2} = e. \quad (1)$$

Найдём вид  $\psi^2$ . Уравнение Шрёдингера для области II запишется в виде:

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

Обозначим  $\frac{2m}{\hbar^2}(E-U) = k_2$ . Во второй области  $k_2$  – мнимое, т.е.  $k_2 = ik$ , где  $k = \frac{2m}{\hbar^2}(U-E)$ . С учётом этого решение уравнения (1) можно записать в виде:

$$\psi_2 = B_2 e^{-ik_2 x} = B_2 e^{-kx}.$$

Подставляя это значение в (1), получим  $\frac{B_2^2}{B_2^2 e^{-2k_2 x x_{эфф}}} = e$ , откуда  $x_{эфф} = \frac{1}{2k} = \frac{1}{\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U-E)}}$ , т.е. чем

больше масса, тем меньше глубина проникновения. Пусть имеем электрон  $m_e = 9,1 \cdot 10^{-31}$  кг. Рассчитаем  $x_{эфф}$ , когда  $U - E = 1$  эВ. Сделаем то же самое для протона  $m_p = 1,67 \cdot 10^{-27}$  кг.

$$x_{эфф} = \frac{1}{\frac{2}{1,05 \cdot 10^{-34}} \sqrt{2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}}} = 10^{-10} \text{ м} = 1 \text{ \AA}^0.$$

$$x_{эфф} = \frac{1}{\frac{2}{1,05 \cdot 10^{-34}} \sqrt{2 \cdot 1,67 \cdot 10^{-27} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}}} = 10^{-12} \text{ м} = 10^{-2} \text{ \AA}^0$$

Из расчёта следует:

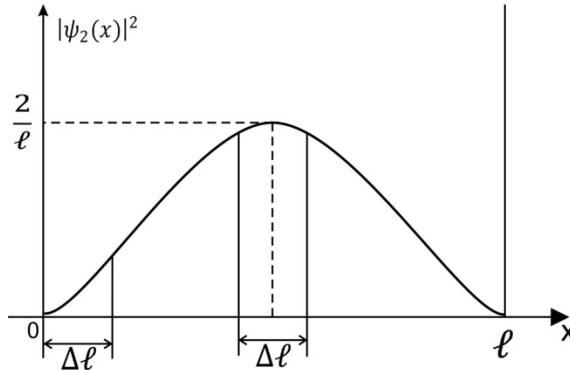
1. Поскольку размер атома порядка  $1 \text{ \AA}^0$ , то электрон может туннелировать из атома, а протон – практически нет.

2. Размер ядра  $10^{-14} - 10^{-15}$  м, поэтому протон может туннелировать из ядра.

4. Функция  $\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{\ell}} \sin \frac{\pi x}{\ell}$  описывает основное состояние частицы в бесконечно глубоком потенциальном

ящике шириной  $\ell$ . Вычислить вероятность нахождения частицы в малом интервале  $\Delta\ell = 0,01\ell$  в двух случаях:

1. Вблизи стенки ( $0 \leq x \leq \Delta\ell$ ).
2. В средней части ящика ( $\frac{\ell}{2} - \frac{\Delta\ell}{2} \leq x \leq \frac{\ell}{2} + \frac{\Delta\ell}{2}$ ).



Решение:

По определению  $dp = |\psi(x)|^2 dx$ . Тогда:

$$1. p = \frac{2}{\ell} \int_0^{0,01\ell} \sin^2 \frac{2\pi}{\ell} x dx. \text{ В данном случае } \sin^2 \frac{2\pi}{\ell} x \approx \left( \frac{\pi}{\ell} x \right)^2.$$

Тогда:

$$p = \frac{2}{\ell} \int_0^{0,01\ell} \left( \frac{\pi}{\ell} x \right)^2 dx = \frac{2\pi^2}{\ell^3} \int_0^{0,01\ell} x^2 dx = \frac{2}{3} \pi^2 \cdot 10^{-6} = 6,6 \cdot 10^{-6}.$$

2. Диапазон  $\Delta\ell$  лежит вблизи  $\max$ , поэтому можно полагать  $|\psi(x)|^2 = \text{const}$ , тогда:

$$p = \left| \psi \left( \frac{\ell}{2} \right) \right|^2 \Delta\ell = \frac{2}{\ell} \left( \sin \frac{\pi}{\ell} \cdot \frac{\ell}{2} \right)^2 \Delta\ell = \frac{2}{\ell} \cdot 1 \cdot 0,01\ell = 0,02.$$

5. Атом испустил фотон с длиной волны  $\lambda = 5500 \text{ \AA}$ . Продолжительность излучения  $10^{-8} \text{ с}$ . Определить

наименьшую погрешность, с которой может быть измерена длина волны излучения.

Решение:

Энергия фотона  $E = \hbar \omega = \frac{2\pi \hbar c}{\lambda}$ . Возьмем

производную по  $\lambda$ :

$$dE = -2\pi \hbar c \frac{d\lambda}{\lambda^2} \quad \text{или} \quad \Delta E = -\frac{2\pi \hbar c \Delta \lambda}{\lambda^2},$$

откуда:

$$\Delta \lambda = \frac{(\Delta E) \lambda^2}{2\pi \hbar c}. \quad (1)$$

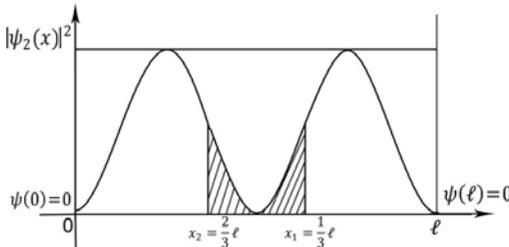
Соотношение неопределенностей Гейзенберга для энергии и времени:

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \text{откуда} \quad \Delta E = \frac{\hbar}{2 \Delta t}. \quad (2)$$

Подставляя (2) в (1), получим:

$$\Delta \lambda = \frac{\hbar}{2 \Delta t} \cdot \frac{\lambda^2}{2\pi \hbar c} = \frac{\lambda^2}{4 \Delta t \pi c} = \frac{5,5^2 \cdot 10^{-14}}{4 \cdot 10^{-8} \cdot 3,14 \cdot 3 \cdot 10^8} = 10^{-14} \text{ м.}$$

6. Электрон находится в одномерном бесконечно глубоком прямоугольном потенциальном ящике шириной  $\ell$ . Вычислить вероятность того, что электрон, находясь в возбужденном состоянии ( $n = 2$ ), будет находиться в средней трети ящика.



Решение:

По определению вероятность  $P$  обнаружить частицу в интервале  $x_1 < x < x_2$  определяется равенством

$$P = \int_{x_1}^{x_2} |\psi_n(x)|^2 dx, \quad (1)$$

где  $\psi_n(x)$  – нормированная собственная  $\psi$ -функция, отвечающая данному состоянию.

В нашем случае  $n = 2$ , тогда:

$$\psi_2(x) = \sqrt{\frac{2}{\ell}} \sin \frac{2\pi}{\ell} x. \quad (2)$$

Поставив (2) в (1), получим:

$$P = \frac{2}{\ell} \int_{x_1}^{x_2} \sin^2 \frac{2\pi}{\ell} x dx \quad (3)$$
$$x_1 = \frac{1}{3}\ell, x_2 = \frac{2}{3}\ell.$$

Заменив в (3)  $2 \sin^2 \frac{2\pi}{\ell} \cdot x = 1 - \cos \frac{4\pi}{\ell} \cdot x$ , возьмем

интеграл:

$$P = \frac{1}{\ell} \left( \int_{\ell/3}^{2\ell/3} dx - \int_{\ell/3}^{2\ell/3} \cos \frac{4\pi}{\ell} x dx \right) = \frac{1}{\ell} \left( \frac{\ell}{3} - \frac{\ell}{4\pi} \sin \frac{4\pi}{\ell} x \Big|_{\ell/3}^{2\ell/3} \right) =$$
$$= \frac{1}{3} - \frac{1}{4\pi} \left( \sin \frac{8}{3}\pi - \sin \frac{4}{3}\pi \right) = \frac{1}{3} - \frac{1}{4\pi} \cdot 2 \cdot \sin \frac{\pi}{3} = 0.195.$$

## Библиографический список

1. *Арцимович Л.А.* Что каждый физик должен знать о плазме. – М.: Атомиздат, 1976. – 112 с.
2. *Вайнберг С.* Первые три минуты. Современный взгляд на происхождение Вселенной: пер. с англ./под ред. Я.Б. Зельдовича. – М.: Энергоиздат, 1991. – 208 с.
3. *Гарднер М.* Этот правый, левый мир: пер. с англ. – Изд. 2-е. – М.: Мир, 1967. – 268 с.
4. *Детлаф А.А.* Курс физики / А.А. Детлаф, Б.М. Яворский. – М.: Высш. шк., 1989. – 607 с.
5. *Дирак П.А.М.* Пути физики: пер. с англ. – М.: Энергоатомиздат, 1983. – 88 с.
6. *Мухин К.Н.* Экспериментальная ядерная физика: в 2 т. – Изд. 4-е. – М.: Энергоатомиздат, 1983. – Т. 1. – 616 с.; Т. 2. – 376 с.
7. *Оррир Дж.* Физика: пер. с англ.: в 2 т. – М.: Мир, 1981. – 622 с.
8. *Окунь А.Б.* Физика элементарных частиц. – М.: Наука, 1984. – 224 с.
9. *Савельев И.В.* Курс общей физики. – М.: Наука, 1982. – Т. 3. – 224 с.
10. *Трофимова Т.И.* Курс физики. – М.: Высш. шк., 2003. – 542 с.
11. *Фейнман Р.* Фейнмановские лекции по физике: пер. с англ. / Р.Фейнман, Р. Лейтон, М. Сэндс. – М.: Мир, 1965. – Вып. 1. – 268 с.; вып. 2. – 168 с.; вып. 3. – 238 с.; вып. 4. – 261 с.
12. *Фраунфельдер Г.* Субатомная физика: пер. с англ./ Г. Фраунфельдер, Э. Хенли. – М.: Мир, 1979. – 736 с.

## Содержание

Введение.....	3
1. Квантовая теория Бора.....	4
2. Волны де Бройля .....	7
3. Соотношение неопределённостей .....	14
4. Волновая функция.....	20
5. Уравнение Шрёдингера .....	23
6. Принцип причинности в квантовой механике .....	24
7. Движение свободной частицы .....	25
8. Туннельный эффект .....	27
9. Частица в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками.....	34
10. Гармонический осциллятор.....	41
11. Квантование момента импульса .....	46
Контрольные вопросы .....	50
Примеры решения задач .....	51
Библиографический список.....	57

Составитель: Чечуев Владимир Яковлевич  
Викулов Станислав Викторович  
Митина Лия Анатольевна

## **ЭЛЕМЕНТЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ**

Учебное пособие

Редактор Т.К. Коробкова  
Компьютерная вёрстка Т.А. Измайлова

Подписано в печать 21 сентября 2011 г. Формат 60x84<sup>1</sup>/<sub>16</sub>.  
Объем 2,7 уч.-изд. л., 3,6 усл. печ. л.  
Тираж 100 экз. Изд. № 22. Заказ № 321

---

Отпечатано в издательстве

Новосибирского государственного аграрного университета  
630039, Новосибирск, ул. Добролюбова, 160, каб. 106.  
Тел./факс (383) 267-09-10. E-mail: 2134539@mail.ru