

14. ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Квантовая механика - это раздел физики, изучающий свойства микробъектов и законы их движения.

Классическая механика является частным случаем квантовой механики. При переходе от микробъектов к макрообъектам законы квантовой механики превращаются в законы классической механики.

§ 14.1 Волновые свойства частиц

В 1824 году французский физик **Луи де Бройль** выдвинул гипотезу о том, что корпускулярно-волновой дуализм присущ не только квантам видимого диапазона спектра, но и всем частицам. Согласно гипотезе де Бройля корпускулярно-волновой дуализм является универсальным и фундаментальным свойством материи. Следовательно, любая движущаяся частица вещества должна обладать и корпускулярными, и волновыми свойствами.

Он предложил с каждым микробъектом связывать, с одной стороны, корпускулярные характеристики энергию E и импульс p , а с другой стороны волновые характеристики, такие, например, как длина волны λ .

Согласно гипотезе де Бройля, для любой частицы, обладающей импульсом p , справедливо соотношение

$$\lambda = \frac{h}{p}, \quad (14.1)$$

где λ - **длина волны де Бройля**, свойственная данной движущейся частице, p -импульс частицы, $h = 6.63 \cdot 10^{-34}$ Дж·с - постоянная Планка.

Следовательно, де Бройль впервые теоретически обосновывает, что движение любой частицы сопровождается волновым процессом. Волновые свойства частиц вещества не обнаруживались ранее потому, что для макроскопических тел существующие длины волн очень малы.

Рассчитаем, например, длину волны де Бройля для частицы массой 1 мг, движущейся со скоростью 1 м/с:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} = \frac{6.62 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}}{10^{-6} \text{ кг} \cdot 1 \frac{\text{м}}{\text{с}}} = 6.62 \cdot 10^{-28} \text{ м}.$$

Такая маленькая длина волны лежит за пределами возможности её обнаружения. Поэтому считается, что макроскопические тела проявляют только одну сторону своих свойств – корпускулярную и не проявляют волновую.

14.1.1 Дифракция электронов

Гипотеза де Бройля была подтверждена экспериментально в опытах Дэвисона и Джермера по отражению электронов от монокристалла. Отраженные от кристалла электроны регистрировались специальным прибором. На рис. 14.1 показана диаграмма углового распределения электронов, отраженных кристаллом. На диаграмме наблюдались четкие периодические максимумы. Имела место дифракция электронов на решетке монокристалла: в направлении дифракционных максимумов двигалось наибольшее число электронов.



Рис. 14.1

Максимумы наблюдаются под углами, удовлетворяющими условию Вульфа - Брегга для длины волны де Бройля. Вычисленная по формуле

(14.1) длина волны де Бройля равна 1.67 \AA . Длина волны, вычисленная из формулы Вульфа -

Брегга, равна 1.65 \AA . Совпадение изумительное. Этими опытами не только были подтверждены волновые свойства электронов, предсказанные де Бройлем, но и была количественно проверена формула де Бройля (14.1).

В 1926 году П. С. Тартаковский независимо от Г. Д. Томсона получил дифракционную картину при прохождении электронного пучка через металлическую фольгу. Полученная картина дифракции оказалась совершенно такой же, как картина дифракции рентгеновских лучей.

В 1948 году советские ученые В. Фабрикант, Д. Биберман и Н. Сугькин экспериментально показали, что волновые свойства присущи не только электронному пучку, но и каждому электрону в отдельности. Через дифракционный прибор пропускался настолько слабый пучок электронов, что промежуток времени между двумя последовательными актами испускания электронов примерно в $3 \cdot 10^4$ раз повышал время, необходимое для прохождения электрона через прибор. В опытах на поведение одного электрона не влияли другие. При длительной экспозиции на фотопластинке возникала такая же дифракционная картина, какую дает пучок электронов. Это было подтверждением гипотезы де Бройля, согласно которой каждая микрочастица является носителем волновых свойств.

В настоящее время экспериментально доказано существование волновых свойств у нейтронов, протонов и даже некоторых атомов и молекул. Это свидетельствует о том, что волновые свойства частиц являются универсальным, то есть всеобщим свойством материи.

§ 14.2 Необычные свойства микрочастиц

Микрочастицами называются как отдельные элементарные частицы (электроны, протоны, нейтроны, фотоны и др.), так и сложные частицы (молекулы, атомы, ядра и т.п.).

Качественно отличительным признаком элементарных частиц является органическое сочетание в них корпускулярных и волновых свойств.

По современным представлениям микрочастицы не являются ни волнами, ни частицами в привычном для нас смысле, а представляют собой весьма сложные образования, диалектически сочетающие в себе противоположные качества. Волновые и корпускулярные представления - это лишь два неполных и односторонних отражения свойств единого целого нашим сознанием на определенном этапе познания.

Отличие микрочастицы от волны заключается в том, что она всегда обнаруживается как неделимое целое.

Отличие микрочастицы от макрочастицы заключается в том, что она не обладает одновременно определенными значениями координаты и импульса, вследствие чего понятие траектории, применительно к микрочастице, утрачивает смысл.

Волновые свойства электронов стали основой для развития новой отрасли науки - электронной оптики. Например, создан электронный микроскоп, обладающий большим увеличением (более миллиона раз) и большой разрешающей способностью.

14.2.1 Соотношения неопределенности Гейзенберга

В классической механике для движущегося тела всегда можно одновременно и точно определить его координату x и скорость v (или импульс mv) и, следовательно, найти его траекторию. Между тем оказалось, что для микрочастиц это можно сделать лишь приближенно. Основное затруднение здесь в том, что для объяснения экспериментальных фактов приходится описывать частицы то с корпускулярной точки зрения, то с волновой.

Одни и те же объекты, например, электроны в опыте с камерой Вильсона оставляют резко очерченные следы, то есть ведут себя как частицы, движущиеся по определенной траектории. В опыте же с прохождением через микрокристаллические пластинки частицы дают светлые и темные интерференционные кольца, то есть ведут себя как волны, подчиняющиеся принципу суперпозиции.

Поскольку, свойства частиц и волн не только различны между собой, но и во многих отношениях взаимоисключают друг друга, то приходится заключить, что электроны на самом деле не являются в обычном смысле ни частицей, ни волной.

Таким образом, поскольку мы вынуждены для описания одних и тех же объектов пользоваться и волновой и корпускулярной картинами, мы уже не можем приписывать этим объектам все свойства частиц и все свойства волн.

Наличие волновых свойств вносит ограничения в применимости понятий, характеризующих частицу в классической механике.

Степень точности, с какой к частице может быть применено представление об определенном положении её в пространстве, даётся соотношением неопределенностей, установленным Гейзенбергом. Это одно из фундаментальных положений квантовой механики. Согласно этому соотношению *координаты и импульс (или скорость) движущейся частицы могут быть одновременно определены лишь с ограниченной степенью точности, то есть они имеют некоторую неопределенность. Произведение неопределенности Δx координаты частицы на неопределенность проекции импульса на данное направление Δp_x не может быть меньше постоянной Планка.*

$$\Delta p_x \Delta x \geq \hbar. \quad (14.2)$$

Чем точнее определен импульс частицы, тем более неопределенной является ее координата. Возможны состояния частицы, при которых одна из величин имеет вполне точное значение, но тогда вторая величина будет совершенно неопределенной.

Соотношения, аналогичные (14.2), справедливы и для других координат, то есть

$$\Delta p_y \Delta y \geq \hbar,$$

$$\Delta p_z \Delta z \geq \hbar.$$

Наличие волновых свойств вносит ограничения в применимости понятий, характеризующих частицу в классической механике.

Учитывая связь между импульсом и энергией, можно получить соотношение неопределенности для энергии E и времени τ :

$$\Delta E \Delta \tau \geq \hbar, \quad (14.3)$$

где ΔE - неопределенность энергии некоторого состояния системы и $\Delta \tau$ время в течение которого система находится в состоянии с энергией E . Чем больше время жизни системы в данном состоянии, тем точнее может быть определена ее энергия.

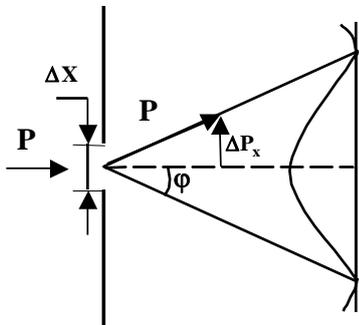


Рис. 14.2

Проведем качественную оценку соотношения (14.3).

Для определения положения свободно летящей микрочастицы поставим на её пути щель шириной Δx перпендикулярно к направлению движения частицы (рис. 14.2, 14.3). До прохождения частицы через щель для её составляющей импульса p_x можно записать $\Delta p_x = 0$, но координата x частицы согласно соотношению Гейзенберга является совершенно неопределенной ($x = \infty$).

В момент прохождения частицы через щель положение меняется. Вместо полной неопределенности координаты x появляется неопределенность Δx , но это достигается ценой

утраты определенности значения p_x . Действительно,

$\Delta p_x = p \sin \varphi$, где φ - угол, соответствующий первому дифракционному минимуму.

Условие первого минимума, получающегося от щели шириной Δx , является выражение $\sin \varphi = \frac{\lambda}{\Delta x}$.

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

или

$$\Delta p_x \Delta x = p \lambda = p \frac{h}{p} = h = 2\pi \frac{h}{2\pi} = 2\pi \hbar \geq \hbar, \text{ то есть } \Delta p_x \Delta x \geq \hbar.$$

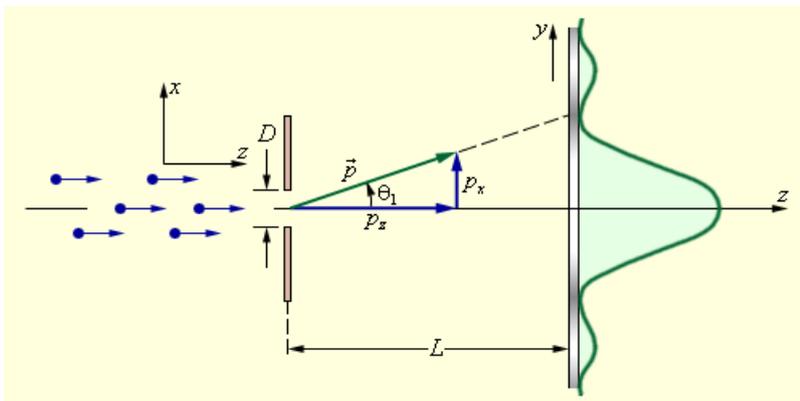


Рис. 14.3

Соотношение неопределенности является прямым следствием волновых свойств микрочастиц. Отражая своеобразие микромира, оно свидетельствует о том, что возможности описания поведения микрочастиц с помощью понятий классической физики ограничены.

14.2.2 Философское толкование соотношений неопределенности

Некоторые физики и философы считают, что соотношение неопределенностей якобы устанавливает границу познаваемости мира, указывает на возможность существования элементарных частиц вне пространства и времени, отменяет законы причинности и т.д.

В действительности соотношения неопределенностей не ставят какого-либо предела, а являются лишь выражением неприменимости представлений классической механики к движению микроскопических частиц. Точнее говоря, эти соотношения дают количественную меру того, до каких пределов еще можно описывать состояние микрообъектов одновременным заданием координат и импульсов подобно тому, как это делается в классической механике для микроскопических тел. Источником соотношений неопределенности являются своеобразные физические свойства электронов и других микрочастиц. Их необычное поведение вынуждает учёных применять корпускулярно – волновое описание для объяснения этих свойств. Ограничение применимости классических представлений в области явлений атомного мира ни в коем случае не означает ограничение механистической картины мира.

Дальнейшее развитие физики, принесшее столь значительные успехи в познании внешнего мира, в частности развитие атомной физики, с полной отчетливостью показало всю ограниченность механистического мировоззрения.

Соотношение неопределенности является одним из фундаментальных положений квантовой механики. Оно позволяет объяснить многие важные результаты. В частности, оно позволяет объяснить тот факт, что электрон не падает на ядро атома, позволяет получить размеры атома и минимально возможную энергию электрона в таком атоме.

Следует, конечно, иметь в виду, что квантовая механика, как всякая физическая теория, также имеет свои границы применимости. В частности, она не дает ответа на вопрос, почему электроны ведут себя столь странным образом, так как вопросы, относящиеся к самой природе микрочастиц, выходят за ее границы. Решения обширного круга в высшей степени глубоких проблем о природе микрочастиц, о превращениях одних элементарных частиц в другие и т.п., современная физика ожидает от следующего этапа развития теории микромира.

§ 14.3 Волновая функция и её статистический смысл

Движение микрочастицы в квантовой механике описывается с помощью некоторой функции координат и времени - волновой функции ψ (пси-функции), являющейся основной характеристикой частицы. Конкретный вид ψ - функции определяется состоянием частицы, характером действия на нее сил. Физический смысл имеет не сама ψ - функция, а квадрат ее модуля, т. е. $|\psi|^2$, который характеризует вероятность пребывания частицы в определенной точке пространства. Величина $|\psi|^2$ есть плотность вероятности (вероятность, отнесенная к единице объема) нахождения, частицы в соответствующем месте пространства. Таким образом, волновая функция имеет вероятностный характер. Очевидно, что и волны де Бройля носят вероятностный характер.

14.3.1 Уравнение Шредингера

Вид $|\psi|$ - функции в каждом конкретном случае можно получить путем решения волнового уравнения Шредингера, имеющего вид

$$\Delta \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \psi = 0, \quad (14.9)$$

где

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

Уравнение (14.9) описывает стационарные состояния. Уравнение Шредингера в общем виде имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + U\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} . \quad (14.10)$$

Уравнение Шредингера - основное уравнение квантовой механики. Решение уравнения дает статистическое распределение частиц.

Уравнение (14.9) или (14.10) само по себе еще не вполне определяет функцию ψ . Чтобы функция ψ была определена, необходимо чтобы она была непрерывной, однозначной, конечной и удовлетворяла условию нормировки

$$\int_0^{\infty} |\psi|^2 dV = 1 .$$

Накладываемые на ψ требования приводят к тому, что решение волнового уравнения, удовлетворяющее перечисленным выше условиям, существует не при любых, а только при некоторых значениях параметра, получивших название собственных значений.

Соответствующие этим собственным значениям решения волнового уравнения называются собственными функциями. Таким образом, из уравнения Шредингера совместно с налагаемыми на функцию ψ условиями, непосредственно вытекают правила квантования энергии.

Возможные значения энергии образуют так называемый энергетический спектр. Если движение частицы не ограничено в пространстве, то ее энергетический спектр будет непрерывным. Если же положение частицы в пространстве ограничено, то энергетический спектр будет дискретным.

§ 14.4 Квантование физических величин

14.4.1 Квантовые числа

Состояние любого электрона в атоме определяется совокупностью четырех квантовых чисел:

1. **Главного квантового числа** $n = 1, 2, 3, \dots, \infty$, которое определяет энергию электрона, обусловленную его взаимодействием с ядром.

Каждому значению n соответствует свой энергетический уровень. С ростом n квантованные значения энергии увеличиваются, растет размер электронного облака. Полную механическую энергию электрона в атоме водорода можно определить по формуле

$$E_n = -\frac{1}{n} \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^2} , \quad (14.11)$$

где E_n - полная механическая энергия электрона в атоме водорода,

n - главное квантовое число, m - масса электрона, e - заряд электрона,

ε_0 - электрическая постоянная, h - постоянная Планка.

2. **Орбитального квантового числа** $l = 0, 1, 2, 3, \dots, (n-1)$, которое определяет значение орбитального момента импульса электрона и определяет форму электронной орбиты (электронного облака).

Величину орбитального момента импульса электрона можно определить по формуле

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

где L - величина орбитального момента импульса электрона,

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

l - орбитальное квантовое число.

Квантовые числа n и l определяют функцию радиального распределения вероятности пребывания электрона в атоме. На рис. 14.4 показаны графики этих функций для атома водорода.

Видно, что электрон может находиться в любой точке атома, однако, вероятность его пребывания в различных областях пространства неодинакова. Каждому значению l соответствует своя

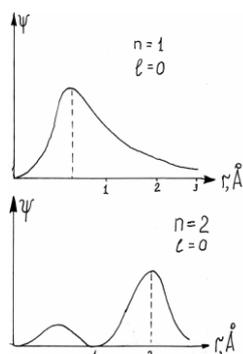


Рис.14.4

форма орбитали. Под **орбиталью** подразумевается совокупность положений электрона. Каждой орбитали соответствует определенная волновая функция ψ . Подуровни (состояния) с $l = 0, 1, 2, \dots$ принято обозначать буквами s, p, d и т.д.

3. **Магнитного квантового числа** $m = 0; \pm 1; \pm 2; \pm 3 \dots; \pm l$, которое позволяет определить величину проекции орбитального момента импульса электрона на направление внешнего магнитного поля и определяет пространственную ориентацию электронной орбитали в пространстве. Ориентация орбитали может осуществляться $2(l+1)$ способами.

Величину проекции орбитального момента импульса электрона можно определить по формуле

$$L_z = m\hbar,$$

где L_z - величина проекции орбитального момента импульса электрона на направление внешнего магнитного поля,

m - магнитное квантовое число.

4. **Магнитного спинового квантового числа** m_s , которое определяет проекцию собственного момента импульса L_{sz} электрона (то есть его спина) на направление внешнего магнитного поля.

Наблюдения показывают, что электрон обладает собственным механическим моментом импульса L_s , который называется **спином** и который не зависит от характеристик движения электрона. **Спин** – важнейшее свойство не только электрона, но и всех элементарных частиц, имеющих квантовую природу и не связанный с движением частицы как целого.

Величину собственного момента импульса электрона (то есть спина электрона) можно определить по формуле

$$L_s = \hbar \sqrt{s(s+1)},$$

где L_s - собственным механическим моментом импульса,

s - спиновое квантовое число.

Для электрона $s = \pm \frac{1}{2}$.

Величину проекции собственного момента импульса электрона L_{sz} (то есть его спина) на направление внешнего магнитного поля можно определить по формуле

$$L_{sz} = m_s \hbar.$$

Для электрона в атоме таких ориентаций может быть две. Так как для электрона $s = \pm \frac{1}{2}$, следовательно, проекция спина электрона на направление внешнего магнитного поля может быть равна $L_{sz} = \pm \frac{1}{2} \hbar$.

Четыре квантовых числа n, l, m, m_s дают полное описание электрона в атоме. Согласно уравнению (14.11) энергия электрона зависит только от главного квантового числа. Следовательно, каждому собственному значению энергии E_n (кроме E_1) соответствует несколько собственных функций Ψ_{\min} , отличающихся значениями квантовых чисел. Это означает, что атом водорода может иметь одно и то же значение энергии, находясь в нескольких различных состояниях.

Состояние с одинаковой энергией называются **вырожденными**, а число различных состояний с каким-либо значением энергии называется **кратностью вырождения** соответствующего энергетического уровня. Кратность вырождения уровней водорода равна

$$\sum_{l=0}^{n-1} 2(2l+1) = 2 \cdot n^2$$

Распределение электронов в атоме подчиняется принципу Паули и принципу минимума энергии (электрон занимает состояние с наименьшей энергией).

Принцип Паули заключается в том, что в одном и том же квантовом состоянии не могут находиться одновременно даже два электрона.

Иными словами, в одном и том же атоме не может быть двух электронов, обладающих одинаковой совокупностью четырех квантовых чисел.

На основании этих двух принципов можно установить связь между распределением электронов в атоме по энергетическим состояниям и положениям атомов в периодической системе элементов Д. И. Менделеева.

§ 14.5 Некоторые частные случаи движения элементарных частиц

14.5.1 Движение частицы в глубокой одномерной потенциальной яме

Уравнение Шредингера позволяет определить вероятность нахождения частицы в различных точках пространства. Кроме того, из уравнения Шредингера и условий, налагаемых на пси-функцию, непосредственно вытекают правила квантования энергии.

В уравнение Шредингера входит в качестве параметра полная энергия частицы E . Как уже отмечалось, решение уравнения Шредингера, удовлетворяющее стандартным условиям, существует не при любых значениях параметра (т.е. энергии E), а лишь при некоторых избранных значениях. Эти избранные значения называются собственными значениями соответствующей величины. Решения, соответствующие собственным значениям E , называются собственными функциями задачи.

В случае дискретного спектра, собственные значения и собственные функции можно пронумеровать:

$$E_1, E_2, \dots, E_n, \quad \psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n.$$

Таким образом, квантование энергии получается из основных положений квантовой механики без каких-либо дополнительных предположений.

Найдем собственные значения энергии и соответствующие им собственные функции для частицы, находящейся в бесконечно глубокой одномерной потенциальной яме.

Предположим, что частица может двигаться только вдоль оси X , в отрезке между $x = 0$ и $x = a$ (рис. 14.5).

В пределах этого отрезка потенциальная энергия частицы является постоянной. Ее удобно принять равной нулю (потенциальную энергию можно отсчитывать от любого выбранного уровня). За пределами отрезка потенциальная энергия обращается в бесконечность. Таким образом, имеем:

$$U(x) = \begin{cases} 0 & \text{при } 0 \leq x \leq a, \\ \infty & \text{при } x < 0, \quad x > a. \end{cases}$$

Уравнение Шредингера для случая одномерной потенциальной ямы имеет вид

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\Psi = 0.$$

Обозначим

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = k^2,$$

получим уравнение

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + k^2\Psi = 0.$$

Общим решением этого уравнения является уравнение вида:

$$\Psi(x) = A \sin(kx + \alpha).$$

Так как потенциальная яма является бесконечно глубокой, то движение может происходить лишь в пределах этой ямы. Выйти за пределы ямы частица не может. Поэтому вероятность

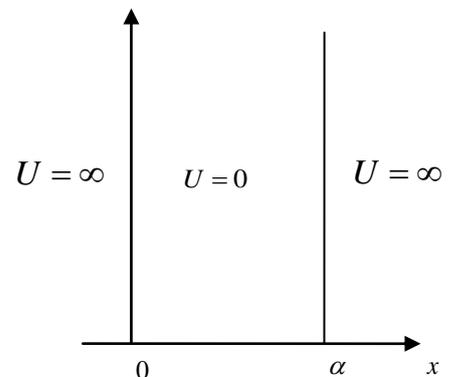


Рис. 14.5

обнаружить частицу, а следовательно и функция ψ за пределами ямы равны нулю. Из условия непрерывности следует, что ψ должна быть равна нулю и в точках $x = 0$ и $x = a$, т.е. на границах ямы:

$$\begin{aligned}\psi(0) &= 0, \\ \psi(a) &= 0\end{aligned}$$

Использование первого краевого условия позволяет определить α :

$$\Psi(0) = A \sin(k \cdot 0 + \alpha) = 0,$$

отсюда

$$\alpha = 0 \text{ и } \psi(x) = A \sin(kx).$$

Второе краевое условие при $x = a$ дает $0 = A \sin(ka)$ Это возможно лишь в случае, если

$$ka = \pm n\pi,$$

($n = 0$ отпадает, поскольку при этом получается $\psi = 0$ - частица нигде не находится).

Подставим это значение в уравнение для $k = 2$, тогда получим выражение для квантованной энергии

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Итак, частица, находящаяся в потенциальной яме, может иметь только дискретные (квантовые) значения энергии. Эти значения принято называть уровнями энергии.

Необходимо отметить, что полученный результат резко отличается от аналогичных результатов в классической механике. Энергия частицы в классической механике могла бы принимать любые значения и вероятность ее обнаружения была бы одинаковой для любой точки на оси X .

Энергия частицы, для которой справедливы законы квантовой механики, может принимать только ряд строго определенных значений характеризуемых величиной целочисленного коэффициента n , которое называется квантовым числом. Уровни частицы в потенциальном ящике показаны на рис. 14.6. Состояние с наименьшей энергией называется основным. В данном случае квантование энергии получается как неизбежный результат решения уравнения Шредингера, хотя само это уравнение не содержит набора целочисленных коэффициентов. Расстояние между соседними уровнями равно

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

Для массы молекулы $m \approx 10^{-27}$ кг и расстояния $a \approx 10$ см получается энергия ΔE равная величине

$$\Delta E_n \approx \frac{3,14^2 (1,05 \cdot 10^{-34})^2}{10^{-27} \cdot 10^{-2}} n \text{ Дж} \approx 10^{-38} n \text{ Дж}$$

Уровни расположены столь густо, что воспринимаются практически как сплошной спектр энергии.

Тот же результат получим для электрона в металле:

$$a \approx 10 \text{ см}, \quad m \approx 10^{-30} \text{ кг}, \quad \Delta E \approx 10^{-35} n \text{ Дж}.$$

В случае рассмотрения электрона в атоме ($a = 10^{-8}$ см), результат будет иной:

$$\Delta E_n \approx \frac{3,14^2 (1,05 \cdot 10^{-34})^2}{10^{-27} \cdot 10^{-16}} n \text{ Дж} \approx 10^{-24} n \text{ Дж}$$

В этом случае дискретность будет проявляться весьма заметным образом.

Найдем собственные функции в виде: $\Psi_n(x) = A \sin \frac{n\pi x}{a}$.

Для нахождения коэффициента A , воспользуемся условием нормировки, которое в данном случае запишется в виде

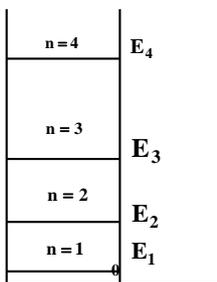


Рис. 14.6

$$\int_0^a |\Psi|^2 dv = 1,$$

или для нашего случая имеем: $A^2 \int_0^a \sin^2 \left(\frac{n\pi x}{a} \right) dx = 1.$

Таким образом, собственные функции имеют вид:

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}, \quad n=1, 2, 3\dots \quad (14.11)$$

График функции (14.11) изображен на рис. 14.7. На нём показана плотность вероятности обнаружения частицы на различных расстояниях от стенок ямы.

Как следует из графиков, частица, например, в состоянии с $n = 2$ не может быть обнаружена в середине ямы и вместе с тем одинаково часто бывает как в левой, так и в правой половине ямы. Данный вид решения, показывающий существование для микрочастицы строго определенного набора разрешенных значений энергии, характерен не только для движения в потенциальной яме. Аналогичный результат получается при рассмотрении задачи, где микрочастицы удерживаются действиями сил в определенной области пространства.

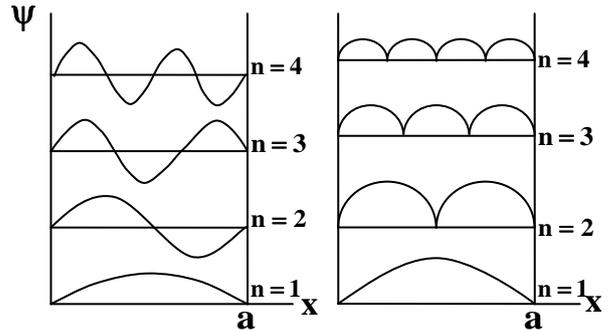


Рис. 14.7

14.5.2 Движение электрона в атоме водорода

Атом водорода состоит из одного протона и электрона. Протон можно считать неподвижным. В атоме водорода или водородоподобном ионе потенциальная энергия электрона равна

$$U = -\frac{Ze^2}{r},$$

где Ze - заряд ядра, r - расстояние между ядром и электроном. Следовательно, уравнение Шредингера имеет вид

$$\Delta\Psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{Ze^2}{r} \right) \Psi = 0, \quad (14.12)$$

где m - масса электрона.

Поле, в котором движется электрон, является центрально-симметричным, и поэтому уравнение (14.12) решается в сферических координатах. Функцию Ψ удобно представить в виде произведения трех функций, каждая из которых содержит только одну переменную:

$$\Psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r) \cdot \Theta(\vartheta) \cdot \Phi(\varphi), \quad (14.13)$$

где $R(r)$ - радиальная часть волновой функции;

$\Theta(\vartheta) \cdot \Phi(\varphi)$ - составляет ее угловую часть.

Учитывая это, получим уравнение Шредингера в сферических координатах:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \Psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2} + \frac{2m}{\hbar} \left(E + \frac{Ze^2}{r} \right) \Psi = 0$$

Уравнение (14.12) имеет требуемые решения в следующих случаях:

1. При любых положительных значениях E . Это соответствует электрону, пролетающему вблизи ядра и удаляющемуся вновь на бесконечность.

2. При дискретных отрицательных значениях энергии, равных

$$E_n = -\frac{me^4 Z^2}{2\hbar^2 n^2}, \quad n=1, 2, 3\dots \quad (14.14)$$

В данном случае электрон находился в пределах атома.

Уравнение (14.14) показывает, что квантовая механика приводит к таким же значениям энергии водородного атома, какие получились и в теории Бора (смотри уравнение 14.5). Однако, в квантовой механике эти значения подучаются как следствие её основных положений.

14.5.3 Квантование момента импульса элементарной частицы

Решение уравнения Шредингера для момента импульса является очень трудным. Поэтому приведем конечный результат:

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

здесь l - *орбитальное квантовое число*.

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

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

Так же квантуется и проекция момента импульса на направление внешнего поля: $L_z = m\hbar$, $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, где m называется *магнитным квантовым числом*.

Как уже отмечалось, квантование проекции момента импульса было обнаружено экспериментально Штерном и Герлахом.

Поскольку проекция вектора не может превзойти модуль этого вектора, должно выполняться условие

$$|m\hbar| \leq \hbar\sqrt{l(l+1)}.$$

Отсюда следует, что максимально возможное значение m равно l , поэтому запишем

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

$$L_z = m\hbar, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l.$$

Из правил квантования момента вытекает, что постоянную Планка можно рассматривать как естественную единицу момента импульса.

Момент импульса системы, состоящей из нескольких микрочастиц равен сумме моментов импульса отдельных частиц.

§ 14.6 Энергия молекул

Молекулой называется наименьшая частица данного вещества, обладающая его химическими свойствами и состоящая из одинаковых или различных атомов, соединенных в одно целое химическими связями.

Различают два вида связи между атомами в молекуле:

- **Гетерополярная (ионная связь)** - это связь возникает в том случае, когда около одного из ядер атомов возникает избыток электронов, а около другого - их недостаток. Молекулы как бы состоит из двух ионов противоположного знака. Возникает Кулоновская сила притяжения. Ионная связь возникает тогда, когда приводит к созданию систему, суммарная энергия, которая меньше суммы внутренней энергии отдельных атомов, образовавших эту систему.

- **Ковалентная (гомополярная) связь**. Она образуется парами электронов с противоположно направленными спинами. При сближение одинаковых или сходных по своим свойствам атомов между ними возникает область перекрытия электронных оболочек атомов. Атомы начинают обмениваться электронами и возникают так называемые обменные силы.

Взаимодействие молекул между собой происходит за счет сил межмолекулярного взаимодействия называемых силами Ван-дер-Ваальса. Они являются следствием взаимодействия электрических дипольных моментов молекул. При сближении двух молекул между собой могут возникнуть три вида взаимодействия: дисперсионное, ориентационная и индукционная.

Изменение энергетического запаса образовавшихся молекулы происходит в результате изменения в электронной конфигурации, образующий периферическую часть молекулы. Однако, при заданной электронной конфигурации ядра, молекулы могут различным образом колебаться и вращаться относительно общего центра инерции. С этими видами движения связаны запасы колебательной и вращательной энергии.

Таким образом, полную энергию молекулы можно представить в виде

$$E = E_{эл} + E_{кол} + E_{вр},$$

где $E_{эл}$ – энергия, обусловленная электронной конфигурацией;

$E_{кол}$ – энергия, соответствующая колебаниям молекулы;

$E_{вр}$ – энергия, связанная с вращением молекулы.

Все три вида энергии квантованы, т.е. могут принимать ряд дискретных значений. Каждому виду энергии соответствует свой набор энергетических уровней.

При поглощении или испускании кванта излучения, которому соответствует частота ω , молекула совершает переход на другой энергетический уровень. При этом полное изменение энергии равно

$$\Delta E = \hbar \omega$$

В общем случае может происходить изменение всех видов энергии.

Для определения энергии колебательного движения атома в молекуле необходимо решить уравнение Шредингера:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E_{кол} - \frac{m\omega_k^2 x^2}{2} \right) \Psi = 0. \quad (14.15)$$

Молекула в целом рассматривается как гармонический осциллятор, т.е. частица, совершающая одномерное движение под действием квазиупругой силы вида $\vec{F} = -k\vec{x}$. Потенциальная энергия такой частицы имеет вид

$$U = \frac{kx^2}{2} = \frac{m\omega x^2}{2}.$$

Уравнение (14.15) имеет конечные, однозначные и непрерывные решения при значениях параметра $E_{кол}$, равных

$$E_{кол} = \left(U + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega^2,$$

где $U = 0, 1, 2, 3, \dots$ – колебательное квантовое число.

Особый интерес представляет энергетическое состояние молекулы при $U = 0$. Это наименьшее возможное значение энергии. Оно равно

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

и называется **нулевой энергией**. Это значит, что ни при каких условиях (даже при $T=0\text{К}$) ядра атомов и молекул не покоятся. Существование нулевой энергии подтверждается экспериментами по изучению рассеяния света кристаллами при низких температурах.

Вращательная энергия молекулы

$$E_{вр} = \frac{I\omega_{вр}^2}{2} = \frac{L^2}{2I}, \quad (14.16)$$

где I – момент инерции молекулы, $L = I\omega_{вр}$ – момент импульса, $\omega_{вр}$ – круговая частота вращения молекулы как целого. Согласно (14.14) момент импульса может принимать лишь дискретные значения:

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

где $j = 0, 1, 2, 3, \dots$ – квантовое число момента импульса.

Следовательно, вращательная энергия молекулы может иметь только квантовые значения:

$$E_{вр} = \frac{\hbar^2 j(j+1)}{2I}.$$

Итак, полная энергия молекулы равна

$$E = E_{эл} + \left(U + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_{кол} + \frac{\hbar^2 j(j+1)}{2I}.$$

Исследования показывают, что расстояние между вращательными уровнями $\Delta E_{вр}$ значительно меньше расстояния между колебательными уровнями $\Delta E_{кол}$, которое в свою очередь значительно меньше, чем расстояние между электронными уровнями $\Delta E_{эл}$, т.е.

$$\Delta E_{эл} > \Delta E_{кол} > \Delta E_{вр}.$$

§ 14.7 Излучение электромагнитных волн атомами и молекулами вещества

14.7.1 Молекулярные спектры

При любом изменении характера движения составляющих молекулу частиц, в результате которого её внутренняя энергия уменьшается, испускается фотон. Оптические спектры молекул совершенно не похожи на спектры входящих в состав молекул атомов. Если атомные спектры состоят из отдельных линий, сгущающихся к границам серий, то молекулярные спектры состоят из полос и называются полосатыми. В зависимости от того, изменение каких видов энергии (электронной, колебательной или вращательной) обуславливается испусканием молекулой фотона, различают три вида полос: вращательные, колебательно-вращательные, электронно-колебательные. Излучаемая молекулой частота равна:

$$\omega = \frac{\Delta E_{эл}}{\hbar} + \frac{\Delta E_{кол}}{\hbar} + \frac{\Delta E_{вр}}{\hbar}.$$

14.7.2 Комбинационное рассеивание света

Комбинационное рассеяние представляет собой рассеяние света на атомах или молекулах. Это явление было открыто в 1928г. советскими учеными Г.С.Ландсбергом и Л.И.Мандельштамом и одновременно индийскими физиками Раманом и Кришнаном. Было выяснено, что монохроматический свет частоты ω_0 рассеивается в веществе (кристаллическом или жидком). Рассеянный свет в своём спектре, кроме несмещенной линии, содержит новые линии – смещенные, называемые красными и фиолетовыми спутниками, частота которых

$$\omega = \omega_0 \pm \omega_i,$$

где ω_0 - частота падающего света, ω_i - частота колебательных или вращательных переходов рассеивающих молекул.

Линии-спутники квантовой механикой объясняются как результат неупругого соударения фотонов с молекулами. При соударении фотон может отдать молекуле и получить от нее только такие количества энергии, которые равны разностям двух энергетических уровней.

При столкновении фотона с невозбужденной молекулой фотон передает энергию $\hbar\omega_i$, возбудив в ней колебания или изменив её вращательную энергию. Рассеянный фотон будет иметь меньшую энергию и, следовательно, меньшую частоту

$$\hbar\omega = \hbar\omega_0 - \hbar\omega_i.$$

Если же фотон сталкивается с возбужденной молекулой, он может отобрать избыточную энергию, из-за чего энергия и частота рассеянного фотона увеличится и станет равной

$$\hbar\omega = \hbar\omega_0 + \hbar\omega_i.$$

§14.8 Туннельный переход

Представим, что внутри области, в которой движется частица, имеется потенциальный барьер высотой U и шириной d (рис. 14.8). Если энергия частицы $E < U$, то обычно частица может находиться либо перед барьером, либо за барьером. Переход через барьер невозможен, так как при этом частица будет иметь отрицательную кинетическую энергию и мнимую скорость, что физически бессмысленно. Иначе обстоит дело для микрочастицы.

Принцип неопределенности не позволяет приписать микрочастице одновременно точные значения скорости и координаты и, следовательно, кинетической и потенциальной энергии. Поэтому частица с

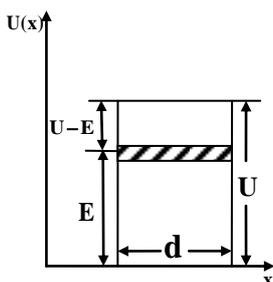


Рис. 14.8

полной энергией E может пройти сквозь барьер. Условия этого перехода можно оценить следующим образом.

Неопределенность координаты и импульса связаны соотношением $\Delta x \Delta P_x \approx \hbar$

Неопределенность в импульсе однозначно связана с неопределенностью в кинетической энергии, так как

$$E_k = \frac{P^2}{2m} \quad \text{и} \quad P = \sqrt{2mE_k}, \quad \text{то} \quad \Delta P = \sqrt{2m\Delta E_k}.$$

Если ширина барьера d меньше Δx , то частица может быть обнаружена по другую сторону барьера. Частица как бы проходит по туннелю, проложенному сквозь барьер на уровне полной энергии E . Таким образом, условие туннельного перехода заключается в том, что строгая теория позволит оценить вероятность просачивания через барьер. Эта вероятность просачивания через барьер равна

$$D \approx \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U-E)} d\right). \quad (14.17)$$

В случае потенциального барьера, произвольной формы постоянную величину U нужно заменить на функцию $U(x)$ в формуле (14.17).

Туннельный эффект является строгим следствием решения уравнения Шредингера. Решение показывает, что волновая функция имеет отличные от нуля значения и в тех точках пространства где $U > E$. Значит, с некоторой вероятностью, тем меньшей, чем больше отрицательной кинетической энергии При преодолении потенциального барьера частица как бы проходит через "туннель" в этом барьере, в связи с чем рассмотренное явление часто называют туннельным эффектом {Пример: радиоактивный распад α -частиц}. Основы теории туннельных переходов были изложены в работах советских физиков Л.И.Мандельштама и М.А.Леонтовича.

Вопросы для самопроверки

1. Волновые свойства частиц. Волны де Бройля. Дифракция электронов
2. Необычные свойства микрочастиц.
3. Соотношение неопределенности Гейзенберга.
4. Волновая функция и её статистический смысл. Уравнение Шредингера
5. Квантование физических величин. Квантовые числа
6. Энергия молекул.
7. Излучение электромагнитных волн атомами и молекулами вещества. Молекулярные спектры.

§ 14.9 Примеры решения задач

Пример 14.1 Электрон, начальной скоростью которого можно пренебречь, прошел ускоряющую разность потенциалов U . Найти длину волны де Бройля λ для двух случаев: 1) $U_1 = 51$ кВ; 2) $U_2 = 510$ кВ.

Решение:

Длина волны де Бройля λ частицы зависит от ее импульса p и определяется формулой

$$\lambda = 2\pi\hbar/p \quad (1)$$

Импульс частицы можно определить, если известна ее кинетическая энергия T . Связь импульса с кинетической энергией для нерелятивистского (когда $T \ll E_0$) и для релятивистского (когда $T \approx E_0$) случаев соответственно выражается формулами:

$$p = \sqrt{2m_0T}, \quad (2)$$

$$p = \frac{1}{c} \sqrt{(2E_0 + T)T}. \quad (3)$$

Формула (1) с учетом соотношений (2) и (3) запишется соответственно в нерелятивистском и релятивистском случаях:

$$\lambda_1 = \frac{h}{\sqrt{2m_0T}}, \quad (4)$$

$$\lambda_2 = \frac{h}{\frac{1}{c}\sqrt{(2E_0 + T)T}}. \quad (5)$$

Сравним кинетические энергии электрона, прошедшего заданные в условии задачи разности потенциалов $U_1 = 51$ В и $U_2 = 510$ кВ, с энергией покоя электрона и в зависимости от этого решим вопрос, которую из формул (4) и (5) следует применить для вычисления длины волны де Бройля.

Как известно, кинетическая энергия электрона, прошедшего ускоряющую разность потенциалов U , равна:

$$T = |e|U.$$

В первом случае $T_1 = |e|U_1 = 51 \text{ эВ} = 0,51 \cdot 10^{-4} \text{ МэВ}$, что много меньше энергии покоя электрона $E_0 = m_0c^2 = 0,51 \text{ МэВ}$. Следовательно, можно применить формулу (4).

Подставив в неё величины, получим:

$$\lambda_1 = \frac{6,63 \cdot 10^{-34}}{\sqrt{2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 51 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}}} = 172 \text{ нм}$$

Во втором случае кинетическая энергия $T_2 = |e|U_2 = 510 \text{ кэВ} = 0,51 \text{ МэВ}$, т. е. равна энергии покоя электрона. Следовательно, необходимо применить релятивистскую формулу (5).

Подставив в неё величины, получим:

$$\lambda_2 = \frac{6,63 \cdot 10^{-34}}{\frac{1}{3 \cdot 10^8} \sqrt{2 \cdot 0,51 \cdot 10^6 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} + 0,51 \cdot 10^6 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}}} = 1,4 \text{ пм}$$

Ответ: $\lambda_1 = 172 \text{ нм}$, $\lambda_2 = 1,4 \text{ пм}$.

Пример 14.2 На грань кристалла никеля падает параллельный пучок электронов. Кристалл поворачивают так, что угол скольжения θ изменяется. Когда этот угол делается равным 64° , наблюдается максимальное отражение электронов, соответствующее дифракционному максимуму первого порядка. Принимая расстояние d между атомными плоскостями кристалла равным 200 пм , определить длину волны де Бройля λ электронов и их скорость.

Решение:

К расчету дифракции электронов от кристаллической решетки применяется то же уравнение Вульфа — Брэгга, которое используется в случае рентгеновского излучения:

$$2d \sin \theta = k\lambda$$

где d — расстояние между атомными плоскостями кристалла; θ — угол скольжения; k — порядковый номер дифракционного максимума; λ — длина волны де Бройля. Очевидно, что

$$\lambda = (2d \sin \theta)/k.$$

Подставив в эту формулу значения величин и вычислив, получим $\lambda = 360 \text{ пм}$.

Из формулы длины волны де Бройля $\lambda = 2\pi\hbar/(mv)$ выразим скорость электрона: $v = \frac{2\pi\hbar}{m\lambda}$.

Подставив в эту формулу значения π , \hbar , m (масса электрона), и произведя вычисления, найдем

$$v = 2Mm/c$$

Ответ: $v = 2Mm/c$.

Пример 14.3 На узкую щель шириной $a = 1$ мкм направлен параллельный пучок электронов, имеющих скорость $3,65$ Мм/с. Учитывая волновые свойства электронов, определить расстояние x между двумя максимумами интенсивности первого порядка в дифракционной картине, полученной на экране, отстоящем на $L = 10$ см от щели.

Решение:

Согласно гипотезе де Бройля, длина волны λ , соответствующая частице массой m , движущейся со скоростью, выражается формулой

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{mv}. \quad (1)$$

Дифракционный максимум при дифракции на одной щели наблюдается при условии

$$\alpha \sin \varphi = (2k+1)(\lambda/2), \quad (2)$$

где $k = 0, 1, 2, 3, \dots$ — порядковый номер максимумов;

α — ширина щели.

Для максимумов первого порядка ($k = 1$) угол φ заведомо мал, поэтому $\sin \varphi = \varphi$, и, следовательно, формула (2) примет вид

$$\alpha\varphi = 3/2\lambda \quad (3)$$

а искомая величина x , как следует из рис. 1,

$$x = 2L \operatorname{tg} \varphi = 2L\varphi \quad (4)$$

так как $\operatorname{tg} \varphi = \varphi$

Подставив значение φ из соотношения (3) в формулу (4), получим

$$x = 2L \frac{3}{2} \frac{\lambda}{a} = 3 \frac{L\lambda}{a}.$$

Подстановка в последнее равенство длины волны де Бройля по формуле (1) дает

$$x = 6 \frac{\pi\hbar L}{amv}.$$

После вычисления по формуле (5) получим $x = 6 \cdot 10^{-7}$ м = 60 мкм.

Ответ: $x = 6 \cdot 10^{-7}$ м.

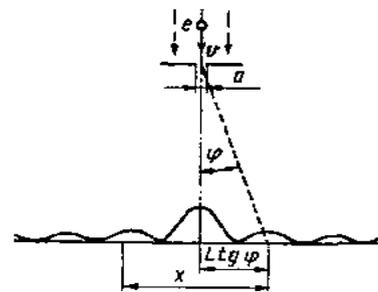


Рис. 1

Пример 14.4 Кинетическая энергия T электрона в атоме водорода составляет величину порядка 10 эВ. Используя соотношение неопределенностей, оцените минимальные линейные размеры атома.

Решение:

Неопределенность координаты и импульса электрона связаны соотношением

$$\Delta x \Delta p \geq \hbar \quad (1)$$

где Δx — неопределенность координаты электрона; Δp — неопределенность его импульса.

Из этого соотношения следует, что чем точнее определяется положение частицы в пространстве, тем более неопределенным становится импульс, а, следовательно, и энергия частицы. Пусть атом имеет линейные размеры l , тогда электрон атома будет находиться где-то в пределах области с неопределенностью $\Delta x = l/2$. Соотношение неопределенностей (1) можно записать в этом случае в виде $(l/2) \Delta p \geq \hbar$, откуда

$$l \geq 2\hbar / (\Delta p) \quad (2)$$

Физически разумная неопределенность импульса Δp , во всяком случае, не должна превышать значения самого импульса p , т. е.

$$\Delta p \leq p$$

Импульс p связан с кинетической энергией T соотношением $p = \sqrt{2mT}$. Заменяем Δp значением $\sqrt{2mT}$ (такая замена не увеличит l). Переходя от неравенства (2) к равенству, получим

$$l_{\min} = \frac{2\hbar}{\sqrt{2mT}}.$$

Подставив числовые значения и произведя вычисления, найдем $l_{\min} = 124$ пм.

Ответ: $l_{\min} = 124$ пм.

Пример 14.5 Используя соотношение неопределенностей энергии и времени, определить естественную ширину $\Delta\lambda$ спектральной линии излучения атома при переходе его из возбужденного состояния в основное. Среднее время τ жизни атома в возбужденном состоянии принять равным 10^{-8} с, а длину волны λ излучения—равной 600 нм. Рис. 1

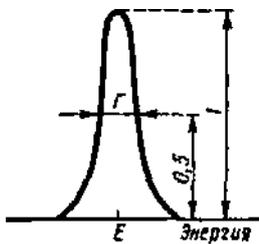


Рис. 1

Решение:

При переходе атомов из возбужденного состояния в основное существует некоторый разброс (неопределенность) в энергии испускаемых фотонов. Это связано с тем, что энергия возбужденного состояния не является точно определённой, а имеет конечную ширину Γ (рис. 1). Согласно соотношению неопределенностей энергии и времени, ширина Γ энергетического уровня возбужденного состояния связана со средним временем τ жизни атомов в этом состоянии соотношением

$$\Gamma \tau = \hbar$$

Тогда ширина энергетического уровня определяется выражением

$$\Gamma = \hbar / \tau$$

Вследствие конечной ширины уровня энергии возбужденного состояния энергия фотонов, испускаемых атомами, также имеет разброс, равный ширине энергетического уровня, т. е. $\Delta\varepsilon = \Gamma$. Тогда

$$\Delta\varepsilon = \hbar / \tau \quad (1)$$

Поскольку энергия фотона связана с длиной волны λ соотношением $\varepsilon = 2\pi\hbar c / \lambda$, то разбросу $\Delta\varepsilon$ ($\Delta\varepsilon \ll \varepsilon$) энергии соответствует разброс $\Delta\lambda$ длин волн ($\Delta\lambda \ll \lambda$)

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

(знак минус опущен).

Входящий в это выражение конечный интервал длин волн $\Delta\lambda$ и есть естественная ширина спектральной линии. Выразив $\Delta\lambda$ из формулы (2) и заменив $\Delta\varepsilon$ согласно (1), получим

$$\Delta\lambda = \frac{\lambda^2}{2\pi c \tau}$$

Произведем вычисления: $\Delta\lambda = 2 \cdot 10^{-14} \text{ м} = 20 \text{ фм}$.

Ответ: $\Delta\lambda = 2 \cdot 10^{-14} \text{ м}$.

Пример 14.6 Электрон находится в бесконечно глубоком одномерном прямоугольном потенциальном ящике шириной l . Вычислите вероятность того, что электрон, находящийся в возбужденном состоянии ($n = 2$), будет обнаружен в средней трети ящика.

Решение:

Вероятность W обнаружить частицу в интервале $x_1 < x < x_2$ определяется равенством

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

где $\psi(x)$ — нормированная собственная волновая функция, отвечающая данному состоянию.

Нормированная собственная волновая функция, описывающая состояние электрона в потенциальном ящике, имеет вид

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{\pi n}{l} x$$

Возбужденному состоянию ($n=2$) отвечает собственная функция

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

Подставив $\psi_2(x)$ в подынтегральное выражение формулы (1) и вынося постоянные величины за знак интеграла, получим

$$W = \frac{2}{l} \int_{x_1}^{x_2} \sin^2 \frac{2\pi}{l} x dx. \quad (3)$$

Согласно условию задачи, $x_1 = \frac{1}{3} l$ и $x_2 = \frac{2}{3} l$. Подставим эти пределы интегрирования в формулу (3) и произведем замену: $\sin^2 \frac{2\pi}{l} x = \frac{1}{2} \left(1 - \cos \frac{4\pi}{l} x \right)$. Разобьем интеграл на два:

$$\begin{aligned} W &= \frac{2}{l} \int_{l/3}^{2l/3} \sin^2 \frac{2\pi}{l} x dx = \frac{1}{l} \left\{ \int_{l/3}^{2l/3} dx - \int_{l/3}^{2l/3} \cos \frac{4\pi}{l} x dx \right\} = \frac{1}{l} \left\{ \frac{l}{3} - \frac{1}{4\pi} \sin \frac{4\pi}{l} x \Big|_{l/3}^{2l/3} \right\} = \\ &= \frac{1}{3} - \frac{1}{4\pi} \left(\sin \frac{8\pi}{3} - \sin \frac{4\pi}{3} \right). \end{aligned}$$

Заметив, что $\sin \frac{8\pi}{3} = \sin \frac{\pi}{3}$, а $\sin \frac{4\pi}{3} = -\sin \frac{\pi}{3}$, получим $W = 0,195$.

Ответ: $W = 0,195$.

Пример 14.7 Электрон с энергией $E = 4,9$ эВ движется в положительном направлении оси x (рис. 1). Высота U потенциального барьера равна 5 эВ. При какой ширине барьера d вероятность W прохождения электрона через него будет равна 0,2?

Решение:

Вероятность W прохождения частицы через потенциальный барьер по своему физическому смыслу совпадает с коэффициентом прозрачности D ($W=D$). Тогда вероятность того, что электрон пройдет через прямоугольный потенциальный барьер, выразится соотношением

$$W \approx \exp \left[-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U-E)} d \right], \quad (1)$$

где m — масса электрона.

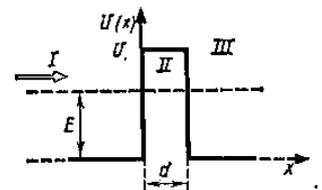


Рис. 1

Потенцируя это выражение, получим $\ln W = -\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U-E)}d$.

Для удобства вычислений изменим знак у правой и левой части этого равенства и найдем d :

$$d = \frac{\hbar \ln(1/W)}{2\sqrt{2m(U-E)}}.$$

Входящие в эту формулу величины выразим в единицах СИ и произведем вычисления:

$$d = 4,95 \cdot 10^{-10} \text{ м} = 0,495 \text{ нм}.$$

Учитывая, что формула (1) приближенная и вычисления носят оценочный характер, можно принять $d \approx 0,5 \text{ нм}$.

Ответ: $d \approx 0,5 \text{ нм}$.

Пример 14.8 Моноэнергетический поток электронов ($E = 100 \text{ эВ}$) падает на низкий прямоугольный потенциальный барьер бесконечной ширины (рис.1). Определите высоту потенциального барьера U , если известно, что 4 % падающих на барьер электронов отражается.

Решение:

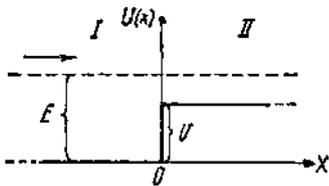


Рис. 1

Коэффициент отражения ρ от низкого потенциального барьера

выражается формулой $\rho = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2$,

где k_1 и k_2 — волновые числа, отвечающие движению электронов в областях **I** и **II** (см. рис.1).

В области **I** кинетическая энергия электрона равна

$$E \text{ и волновое число } k_1 = (1/\hbar) \sqrt{2mE}.$$

Поскольку координата электрона не определена, то импульс электрона определяется точно и, следовательно, в данном случае можно говорить о точном значении кинетической энергии.

В области **II** кинетическая энергия электрона равна $E - U$ и волновое число $k_2 = (1/\hbar) \sqrt{2m(E-U)}$.

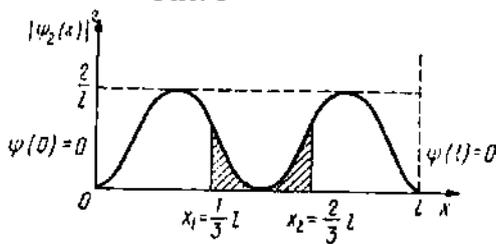


Рис. 2

Коэффициент отражения может быть записан в виде

$$\rho = \left(\frac{\sqrt{2mE} - \sqrt{2m(E-U)}}{\sqrt{2mE} + \sqrt{2m(E-U)}} \right)^2$$

Разделим числитель и знаменатель дроби на $\sqrt{2mE}$

$$\rho = \left(\frac{1 - \sqrt{1-U/E}}{1 + \sqrt{1-U/E}} \right)^2$$

Решая уравнение относительно $\sqrt{1-U/E}$, получим $\sqrt{1-U/E} = \frac{1-\sqrt{\rho}}{1+\sqrt{\rho}}$.

Возведя обе части равенства в квадрат, найдем высоту потенциального барьера:

$$U = \left[1 - \left(\frac{1-\sqrt{\rho}}{1+\sqrt{\rho}} \right)^2 \right] E.$$

Подставив сюда значения величин и произведя вычисления, найдем $U = 55,6 \text{ эВ}$.

Ответ: $U = 55,6 \text{ эВ}$.

Задачи для самостоятельной работы

Задача 14.1 Определить длину волны де Бройля λ_B характеризующую волновые свойства электрона, если его скорость 1 Мм/с. **Ответ:** $\lambda_B = 727 \cdot 10^{-12} \text{ м}$.

Задача 14.2 Какую ускоряющую разность потенциалов U должен пройти электрон, чтобы длина волны де Бройля λ_B была равна 0,1 нм? **Ответ:** $U = 150 \text{ В}$.

Задача 14.3 Электрон движется по окружности радиусом $r = 0,5 \text{ см}$ в однородном магнитном поле с индукцией $B = 8 \text{ мТл}$. Определить длину волны де Бройля λ_B электрона. **Ответ:** $\lambda_B = 0,1 \cdot 10^{-9} \text{ м}$.

Задача 14.4 Электрон с кинетической энергией $T = 15 \text{ эВ}$ находится в металлической пылинке диаметром $d = 1 \text{ мкм}$. Оценить относительную неточность $\frac{\Delta v}{v}$, с которой может быть определена скорость электрона. **Ответ:** $\frac{\Delta v}{v} = 10^{-4}$.

Задача 14.5 Электрон движется со скоростью 200 Мм/с. Определить длину волны де Бройля λ_B , учитывая изменение массы электрона в зависимости от скорости. **Ответ:** $\lambda_B = 2,7 \cdot 10^{-12} \text{ м}$.

Задача 14.6 Электрон с энергией $E = 100 \text{ эВ}$ попадает на потенциальный барьер высотой $U = 64 \text{ эВ}$. Определить вероятность W того, что электрон отразится от барьера.

Коэффициент отражения может быть записан в виде $\rho = \left(\frac{\sqrt{2mE} - \sqrt{2m(E-U)}}{\sqrt{2mE} + \sqrt{2m(E-U)}} \right)^2$.

Ответ: $\rho = 0,0625$.

Задача 14.7 Длина волны излучаемого атомом фотона составляет 600 нм. Принимая время жизни возбуждённого состояния атома 10^{-8} с , определите отношение естественной ширины энергетического уровня, на котором был электрон, к энергии, излучённой атомом.

Ответ: $\frac{\Delta E}{E} = 2 \cdot 10^{-7}$.

Задача 14.8 Электрон, пройдя из состояния покоя ускоряющую разность потенциалов 4,9 В, сталкивается с атомом ртути и переводит его в первое возбуждённое состояние. Какую длину волны имеет фотон, соответствующий переходу атома ртути в нормальное состояние.

Ответ: $\lambda = \frac{ch}{eU} = 533 \cdot 10^{-9} \text{ м}$

Задача 14.9 Найти длину волны де Бройля λ_B для электрона, движущегося по круговой орбите атома водорода, находящегося в основном состоянии.

Ответ: $\lambda_B = 0,33 \cdot 10^{-9} \text{ м}$.

Задача 14.10 Коэффициент отражения протона от потенциального барьера равен $2,5 \cdot 10^{-5}$. Определите, какой процент составляет высота U потенциального барьера от кинетической энергии T падающих на барьер протонов.

Ответ: $\frac{U}{T} = 2\%$.