

**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**

**ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО ПО ОБРАЗОВАНИЮ**

**САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ**



**ПОБЕДИТЕЛЬ КОНКУРСА ИННОВАЦИОННЫХ ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫХ ПРОГРАММ ВУЗОВ**

*К. К. БОЯРСКИЙ, А. В. СМИРНОВ, С. К. СТАФЕЕВ*

# **АТОМНАЯ ФИЗИКА**

Часть 1  
Основы квантовой механики

Учебное пособие



Санкт-Петербург

2007

УДК 530.1

Боярский К. К., Смирнов А. В., Стафеев С. К. Атомная физика часть 1. Основы квантовой механики. Учебное пособие. СПб: СПбГУИТМО, 2007. – 64 с.

В рамках курса общей физики представлены разделы, относящиеся к экспериментальным и теоретическим предпосылкам возникновения современной науки о явлениях микромира: физика теплового излучения, радиоактивность, дифракция электронов. Изложены основы операторного метода квантовой механики. Получены и обсуждены решения квантовомеханических задач о движении микрочастиц в одномерных полях разного вида.

Для студентов второго курса всех технических специальностей.

Печатается по решению Ученого Совета ЕНФ.

Протокол № 6 от 27 февраля 2007 г.



В 2007 году СПбГУ ИТМО стал победителем конкурса инновационных образовательных программ вузов России на 2007–2008 годы. Реализация инновационной образовательной программы «Инновационная система подготовки специалистов нового поколения в области информационных и оптических технологий» позволит выйти на качественно новый уровень подготовки выпускников и удовлетворить возрастающий спрос на специалистов в информационной, оптической и других высокотехнологичных отраслях экономики.

© Санкт-Петербургский государственный университет информационных технологий, механики и оптики (технический), 2007

© К. К. Боярский, А. В. Смирнов,  
С. К. Стафеев, 2007

# Оглавление

Глава 1. Квантовая теория излучения.....	4
1.1. Законы теплового излучения .....	4
1.2. Формула Планка.....	9
1.3. Спонтанное и вынужденное излучение .....	11
1.4. Квантовые эффекты в оптике .....	14
Глава 2. Модель атома Резерфорда-Бора .....	18
2.1. Опыты Резерфорда.....	18
2.2. Постулаты Бора. Опыт Франка и Герца .....	20
2.3. Боровская теория атома водорода.....	22
2.4. Энергетические уровни водорода. Спектральные серии.....	24
Глава 3. Волновые свойства вещества .....	30
3.1. Волны де Бройля .....	30
3.2. Проявления волновых свойств вещества .....	32
3.3. Соотношение неопределенностей .....	36
Глава 4. Квантовомеханические операторы. Уравнение Шредингера .....	40
4.1. Операторы физических величин и их свойства.....	40
4.2. Операторы импульса, энергии и момента импульса.....	42
4.3. Уравнение Шредингера.....	47
Глава 5. Простейшие задачи квантовой механики .....	50
5.1. Частица в бесконечно глубокой потенциальной яме .....	50
5.2. Частица в потенциальной яме конечной глубины.....	51
5.3. Потенциальный барьер. Туннельный эффект .....	54
5.4. Гармонический осциллятор .....	60
5.5. Связанные потенциальные ямы. Вырождение уровней.....	60



# Глава 1. Квантовая теория излучения

## 1.1. Законы теплового излучения

Излучение телами электромагнитных волн (свечение тел) требует энергетических затрат и может осуществляться за счет различных видов энергии. Если свечение происходит за счет внутренней (тепловой) энергии тела, оно называется *тепловым излучением*. Все остальные виды свечения, возбуждаемые за счет любого другого вида энергии, кроме тепловой, называются *люминесценцией*. К ним относятся в первую очередь *хемилюминесценция*, возникающая при некоторых химических превращениях, *электр люминесценция* (свечение газового разряда под действием соударений заряженных частиц), *фотолюминесценция* (излучение, вызываемое предварительным освещением тела) и т. д.

В отличие от других видов излучения, тепловое может находиться в состоянии *термодинамического равновесия* с материальными телами. Рассмотрим несколько тел, нагретых до различной температуры и помещенных в замкнутую оболочку, полностью отражающую падающее на нее излучение (рис. 1.1, а). Каждое из этих тел испускает тепловое излучение, причем его интенсивность возрастает при повышении температуры. Одновременно тела полностью или частично поглощают падающее на них излучение. Через некоторое время температуры всех тел выравниваются, а испускаемая каждым телом лучистая энергия становится в среднем равной поглощаемой энергии. При этом плотность энергии излучения в пространстве между телами достигает определенной величины, соответствующей установившейся температуре (рис. 1.1, б).



**Рис. 1.1.** Установление термодинамического равновесия тел с тепловым излучением

С увеличением температуры внутри оболочки будет возрастать энергия равновесного излучения, и меняться его спектральный состав. Наблюдать эти изменения можно, проделав небольшое отверстие в стенке и регистрируя выходящее из него излучение. Для описания распределения энергии по частотам введем зависящую от температуры *спектральную плотность излучения*  $U_{\omega}(T)$ , тогда величина  $U_{\omega}(T)d\omega$  представляет энергию единицы объема излучения с частотами от  $\omega$  до  $\omega + d\omega$ . В системе СИ  $U_{\omega}$  измеряется в  $[\text{Дж}\cdot\text{с}/\text{м}^3]$ . Если в качестве независимой переменной взять не частоту, а длину волны, то получим спектральную плотность  $U_{\lambda}$  (едини-

цы — [Дж/м<sup>4</sup>]), для которой легко получить соотношение

$$U_{\lambda}(T) = \left(2\pi c/\lambda^2\right) U_{\omega}(T). \quad (1.1)$$

Очевидно, что полная плотность излучения  $U(T)$  может быть найдена интегрированием  $U_{\omega}$  (или  $U_{\lambda}$ ) по всем частотам (или по всем длинам волн):

$$U(T) = \int_0^{\infty} U_{\omega}(T) d\omega = \int_0^{\infty} U_{\lambda}(T) d\lambda. \quad (1.2)$$

В соответствии с *первым законом Кирхгофа, равновесная спектральная плотность энергии зависит только от абсолютной температуры* и не зависит от количественного и качественного состава термодинамической системы. Это означает, что функция  $U_{\omega}(T)$  (или  $U_{\lambda}(T)$ ) является универсальной, не зависящей от вида тел, находящихся в оболочке, материала стенок, коэффициента отражения стенок и т. д.

Для теплового излучения тела, не находящегося в полости (в отсутствие равновесия с излучением) спектральное распределение зависит от материала поверхности. Для описания этого распределения введем понятие *испускательной способности* тела  $r_{\omega}$  (или  $r_{\lambda}$ ), которая представляет собой спектральную плотность потока энергии излучения, испускаемую единичной площадкой поверхности по всем направлениям. Очевидно, что испускательная способность измеряется в [Дж/м<sup>2</sup>]. Полный поток излучения для всех длин волн дает *энергетическую светимость*  $R$  поверхности, измеряемую в [Вт/м<sup>2</sup>]:

$$R = \int_0^{\infty} r_{\omega} d\omega = \int_0^{\infty} r_{\lambda} d\lambda. \quad (1.3)$$

Всякое тело полностью или частично поглощает падающее на него излучение. *Поглощательная способность* (или спектральный коэффициент поглощения)  $a_{\omega}$  показывает, какая доля энергии падающего излучения данной частоты поглощается телом. Это безразмерная величина, которая может принимать значения от 0 до 1. Поглощательная способность зависит от температуры и свойств тела, например, окраски. Тело, которое при любой температуре полностью поглощает всю энергию падающих на него электромагнитных волн, независимо от частоты, поляризации и направления распространения, называется *абсолютно черным телом (АЧТ)*. Моделью АЧТ может служить замкнутая полость, в стенке которой имеется малое отверстие.

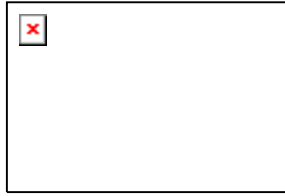


Рис. 1.2. К выводу второго закона Кирхгофа

Рассмотрим поток равновесного теплового излучения  $\Phi_\omega$  в единичном спектральном интервале вблизи частоты  $\omega$ , падающий на единичную площадку поверхности тела. Так как равновесное излучение изотропно, то в пределах телесного угла  $d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$  распространяется энергия, составляющая долю  $d\Omega/4\pi$  от всей энергии. Если выбранное направление образует угол  $\theta$  с нормалью к поверхности (рис 1.2), то поток  $d\Phi_\omega$ , заключенный в телесном угле  $d\Omega$ , связан со спектральной плотностью энергии  $U_\omega$  и равен  $d\Phi_\omega = cU_\omega \cos\theta d\Omega/4\pi$ . Полный поток со всех направлений

$$\Phi_\omega = (cU_\omega/4\pi) \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi/2} \sin\theta \cos\theta d\theta = cU_\omega/4. \quad (1.4)$$

Часть этого потока, равная  $a_\omega\Phi_\omega$ , поглощается, остальная часть  $(1 - a_\omega)\Phi_\omega$  отражается. С отраженным потоком складывается поток собственного теплового излучения поверхности  $r_\omega$ . В условиях равновесия полный исходящий от поверхности поток равен падающему:

$$(1 - a_\omega)\Phi_\omega + r_\omega = \Phi_\omega, \quad (1.5)$$

откуда с учетом формулы (1.4) получаем:

$$r_\omega/a_\omega = cU_\omega/4. \quad (1.6)$$

Соотношение (1.6) выражает *второй закон Кирхгофа*: отношение испускательной способности тела к его поглощательной способности не зависит от материала тела и совпадает (с точностью до множителя  $c/4$ ) со спектральной плотностью равновесного излучения. Это означает, что тело, сильнее поглощающее какие-либо лучи, будет эти лучи сильнее и испускать (не следует смешивать испускание лучей с их отражением).

Для АЧТ  $a_\omega = 1$ , следовательно, спектральное распределение теплового излучения черного тела будет таким же, как у равновесного излучения при той же температуре. Именно поэтому равновесное излучение называют также *черным излучением*. В методе *оптической пирометрии* производится бесконтактное определение температуры путем сравнения энергетических и спектральных характеристик теплового излучения объекта с излучением эталонного АЧТ.

*Коэффициентом (степенью) черноты* называется отношение испускательной способности тела к испускательной способности АЧТ. Если коэффициент черноты меньше единицы и не зависит от частоты излучения, то тело называют *серым*. Если коэффициент черноты различен в различных

частях спектра, то тело называют *селективным* или *цветным*. Непрозрачные тела, у которых степень черноты равна нулю, не излучают и не поглощают электромагнитных волн. Падающее на них излучение эти зеркальные тела полностью отражают.

В 1893 г. Вином было доказано, что спектральная плотность черного излучения должна иметь универсальный вид:

$$U_{\omega}(T) = \omega^3 f(\omega/T), \quad (1.7)$$

где  $f$  — некоторая функция отношения частоты к температуре, конкретный вид которой в рамках классической электромагнитной теории света и термодинамики установить невозможно.

Проинтегрируем соотношение Вина (1.7) по частотам, вводя новую переменную  $x = \omega/T$

$$U(T) = \int_0^{\infty} \omega^3 f\left(\frac{\omega}{T}\right) d\omega = T^4 \int_0^{\infty} x^3 f(x) dx. \quad (1.8)$$

Поскольку второй интеграл не зависит от температуры, плотность равновесного излучения, а, следовательно (в соответствии с (1.6) и (1.3)), и энергетическая светимость, оказываются пропорциональными четвертой степени температуры:

$$R(T) = \sigma T^4. \quad (1.9)$$

Равенство (1.9) называется *законом Стефана-Больцмана*. Постоянная Стефана-Больцмана  $\sigma$  была определена из опыта, ее значение  $\sigma = 5,7 \cdot 10^{-8}$  Вт/(м<sup>2</sup>·К<sup>4</sup>).

Экспериментально установлено, что зависимость  $r_{\lambda}(T)$  (или  $U_{\lambda}(T)$ ), рассматриваемая как функция длины волны, имеет максимум при некотором значении  $\lambda_m$ , причем с увеличением температуры этот максимум смещается в сторону более коротких длин волн. Переходя в (1.7) от частот к длинам волн, с учетом (1.1) получим

$$U_{\lambda}(T) = \frac{2\pi c}{\lambda^2} \left(\frac{2\pi c}{\lambda}\right)^3 f\left(\frac{2\pi c}{\lambda T}\right) = T^5 f_1(\lambda T), \quad (1.10)$$

где  $f_1$  — функция, зависящая от произведения  $\lambda T$ . Дифференцируя ее, находим, что при любой температуре максимумы зависимости  $U_{\lambda}(T)$  и  $r_{\lambda}(T)$  получаются при одном и том же значении  $\lambda_m T$ , что называют *законом смещения Вина*:

$$\lambda_m T = b, \quad (1.11)$$

где константа  $b = 2,90 \cdot 10^{-3}$  м·К.



**Рис. 1.3.** Смещение максимума теплового излучения с ростом температуры (закон смещения Вина)

Реальные зависимости испускательной способности  $r_\lambda$  АЧТ при четырех температурах, отличающихся друг от друга в 1,2 раза, показаны на рис. 1.3. Видно, что даже при 3000 K максимум теплового излучения лежит в ИК-области (видимая часть спектра затенена). Значение спектральной плотности в максимуме в соответствии с (1.10) пропорционально пятой степени температуры.

Попробуем объяснить законы теплового излучения с точки зрения классической электродинамики. Поскольку спектральное распределение равновесного теплового излучения не зависит от того, какие именно тела находятся в тепловом равновесии, рассмотрим простейший вид излучателя: гармонический осциллятор с собственной частотой  $\omega_0$ , зарядом  $e$  и массой  $m$ . В курсе оптики было показано, что такой осциллятор излучает и поглощает излучение только в узкой полосе частот вблизи  $\omega_0$ . Учитывая, что в равновесии поглощаемая мощность (пропорциональная  $U_\omega$ ) равна испускаемой (пропорциональной средней энергии осциллятора  $\langle \varepsilon \rangle$ ), получаем:

$$U_\omega = \omega^2 \langle \varepsilon \rangle / (\pi^2 c^3). \quad (1.12)$$

В соответствии с законом о равномерном распределении энергии, на каждую степень свободы приходится  $kT/2$  кинетической энергии. У осциллятора средние значения кинетической и потенциальной энергии одинаковы, так что

$$\langle \varepsilon \rangle = kT. \quad (1.13)$$

Таким образом, для спектральной плотности равновесного теплового излучения получаем формулу *Рэля-Джинса*:

$$U_\omega = \omega^2 kT / (\pi^2 c^3). \quad (1.14)$$

Нетрудно видеть, что это соотношение удовлетворяет закону Вина



(1.7).

Несмотря на то, что с классической точки зрения вывод формулы Рэля-Джинса безупречен, она согласуется с экспериментом лишь при больших длинах волн (малых частотах) и резко расходится с опытом для малых длин волн (рис. 1.4).

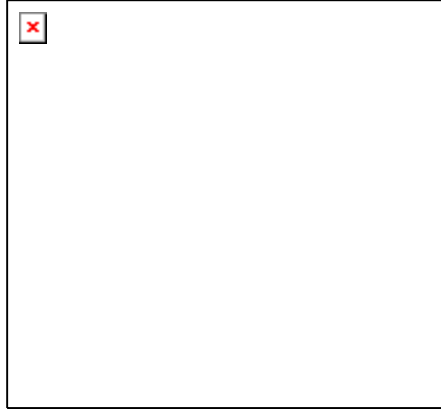


Рис. 1.4. Ультрафиолетовая катастрофа

Более того, интегрирование выражения (1.14) по всем частотам дает для равновесной плотности энергии бесконечно большое значение. Этот результат получил название *ультрафиолетовой катастрофы*: по классической теории получается, что вся энергия тела перейдет в энергию высоких частот излучения и установление термодинамического равновесия вообще невозможно. Расхождение формулы Рэля-Джинса с опытом указывало на существование каких-то закономерностей, несовместимых с представлениями классической физики, и послужило одной из причин великой революции в физике в начале XX века.

## 1.2. Формула Планка

В 1900 г. Планком была получена формула для спектральной плотности равновесного теплового излучения в предположении, что энергия осциллятора может принимать не любые, а только определенные дискретные значения энергии  $\varepsilon_n$ . По гипотезе Планка все разрешенные значения энергии осциллятора кратны некоторой наименьшей энергии:  $\varepsilon_n = n\varepsilon_0$ , где  $n = 0, 1, 2, \dots$ . В этом случае средняя энергия осциллятора в формуле (1.12) не будет равна  $kT$ . Действительно, вероятность того, что осциллятор находится в состоянии с энергией  $\varepsilon_n$ , в соответствии с распределением Больцмана пропорциональна  $\exp[-\varepsilon_n/(kT)]$ . Тогда

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon_n \exp[-\varepsilon_n/(kT)]}{\sum_{n=0}^{\infty} \exp[-\varepsilon_n/(kT)]} = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n\varepsilon_0 \exp[-n\varepsilon_0/(kT)]}{\sum_{n=0}^{\infty} \exp[-n\varepsilon_0/(kT)]}. \quad (1.15)$$

Выражение в знаменателе (1.15) представляет собой геометрическую прогрессию и равно  $S(\beta) = 1/[1 - \exp(-\beta\varepsilon_0)]$ , где  $\beta = 1/kT$ . Выражение же в числителе (1.15) может быть представлено как

$$\sum_{n=0}^{\infty} n\varepsilon_0 \exp(-\beta n\varepsilon_0) = -\frac{dS}{d\beta} = \frac{\varepsilon_0 \exp(-\beta\varepsilon_0)}{[1 - \exp(-\beta\varepsilon_0)]^2}.$$

Таким образом, для средней энергии осциллятора находим:

$$\langle \varepsilon \rangle = \varepsilon_0 / [\exp(\beta\varepsilon_0) - 1]. \quad (1.16)$$

Подставляя полученное значение в (1.12), получаем вместо формулы Рэлея-Джинса:

$$U_{\omega} = \frac{\omega^2 \varepsilon_0}{\pi^2 c^3} \frac{1}{\exp[\varepsilon_0/(kT)] - 1}. \quad (1.17)$$

Формула (1.17) будет удовлетворять термодинамической формуле Вина (1.7), если энергия осциллятора пропорциональна частоте:

$$\varepsilon_0 = \hbar\omega = h\nu, \quad (1.18)$$

где коэффициент пропорциональности  $h = 2\pi\hbar$  называется *постоянной Планка*<sup>1</sup>. По современным данным,  $\hbar = 1,05 \cdot 10^{-34}$  Дж·с. Окончательно для спектральной плотности равновесного теплового излучения получаем *формулу Планка*:

$$U_{\omega}(T) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \frac{1}{\exp[\hbar\omega/(kT)] - 1}. \quad (1.19)$$

Покажем, что обсуждавшиеся выше классические соотношения для теплового излучения могут быть получены из формулы Планка в качестве предельных случаев.

- *Формула Рэлея-Джинса*. Получается из формулы Планка при низких частотах или высоких температурах, когда  $\hbar\omega/(kT) \ll 1$ . Разложив экспоненту в ряд  $\exp[\hbar\omega/(kT)] \approx 1 + \hbar\omega/(kT)$ , получаем формулу (1.14).
- *Закон Стефана-Больцмана* (1.9). Энергетическая светимость АЧТ, определяемая по формуле Планка, равна

$$R(T) = \int_0^{\infty} \frac{\hbar\omega^3}{4\pi^2 c^2} \frac{d\omega}{\exp[\hbar\omega/(kT)] - 1} = \frac{\hbar}{4\pi^2 c^2} \left(\frac{kT}{\hbar}\right)^4 \int_0^{\infty} \frac{x^3 dx}{\exp(x) - 1},$$

где  $x = \hbar\omega/(kT)$ . Интеграл в последнем выражении равен  $\pi^4/15$ . Таким образом, приходим к закону Стефана-Больцмана  $R(T) = \sigma T^4$  с посто-

<sup>1</sup>Иногда величину  $\hbar$  называют постоянной Дирака.

янной  $\sigma = \pi^2 k^4 / (60c^2 \hbar^3) = 5,67 \cdot 10^{-8} \text{ \AA} \hat{\text{d}} / (\text{i}^2 \hat{\text{E}}^4)$ .

- *Закон смещения Вина* (1.11). Перейдем в формуле Планка от частот к длинам волн. С учетом (1.1) получаем:

$$U_\lambda(T) = \frac{16\pi^2 c}{\lambda^5} \frac{1}{\exp[2\pi\hbar c/(kT\lambda)] - 1}.$$

Вводя безразмерную переменную  $x = 2\pi\hbar c/(kT\lambda)$ , сводим задачу к нахождению максимума функции  $f_\lambda(x) = x^5 / (e^x - 1)$ . Дифференцируя, находим  $x = 5(1 - e^{-x})$ . Это уравнение может быть решено численно, его корень  $x = 4,965$ . Отсюда

$$\lambda_m T = \frac{2\pi\hbar c}{4,965k} = b. \quad (1.20)$$

Полученное из (1.20) численное значение константы  $b$  в точности совпадает с приведенным выше экспериментальным значением.

Напомним, что по классической теории энергия (интенсивность) электромагнитных волн определяется квадратом амплитуды и никак не связана с частотой. Гипотеза Планка о пропорциональности энергии и частоты фактически заставляет вновь (после Ньютона) обратиться к корпускулярной теории света.

### 1.3. Спонтанное и вынужденное излучение

Развивая идеи Планка, Эйнштейн в 1905 г. предположил, что дискретный характер присущ не только процессам испускания и поглощения, но и самому свету, представляющему собой поток световых квантов — *фотонов*. По современным физическим представлениям свет обладает так называемым *корпускулярно-волновым дуализмом*, то есть в одних экспериментальных ситуациях проявляют себя преимущественно квантовые свойства света, в других — волновые.

Элементарная квантовая теория теплового излучения строится на основе двухуровневой модели атома: предполагается, что атом имеет два дискретных энергетических состояния — основное с энергией  $W_0$  и возбужденное с энергией  $W_1$ . Число атомов в каждом из этих состояний —  $N_0$  и  $N_1$  — называют *населенностями* соответствующих уровней. Разность энергий основного и возбужденного состояний равна энергии светового кванта, поглощаемого при переходе  $0 \rightarrow 1$  или излучаемого при переходе  $1 \rightarrow 0$ :

$$\hbar\omega = W_1 - W_0. \quad (1.21)$$

По Эйнштейну, возможны следующие типы радиационных переходов между энергетическими уровнями:

- *Спонтанное излучение* (рис. 1.5, а). Атом исходно находится в возбужденном состоянии  $W_1$  и в некоторый случайный момент времени самопроизвольно переходит в основное состояние, испуская фотон. Этот процесс характеризуется вероятностью перехода в единицу времени  $A_{10}$ .



**Рис. 1.5.** Типы радиационных переходов в двухуровневой системе

- *Поглощение* (рис. 1.5, б). Атом находится в основном состоянии и, поглощая квант света, переходит в возбужденное состояние (из которого он через некоторое время вернется в основное состояние). Вероятность такого перехода пропорциональна плотности энергии электромагнитного поля  $U_\omega$  на частоте перехода и некоторому коэффициенту  $B_{01}$ , зависящему от конкретного сорта атомов. При каждом акте поглощения число фотонов уменьшается на единицу.

Указанные типы переходов вполне соответствуют классической теории, однако они не могут обеспечить выполнение условий энергетического баланса. Действительно, если вероятность спонтанного излучения зависит только от внутренних свойств атомов, то вероятность поглощения всегда связана с количеством падающих фотонов с данной частотой. Поэтому детальное равновесие (то есть равновесие для всех частот) не может быть установлено. Для устранения этого противоречия Эйнштейн ввел еще один тип перехода:

- *Вынужденное излучение* (рис. 1.5, в). Атом переходит из возбужденного состояния в основное, но не самопроизвольно, а под воздействием внешнего электромагнитного поля. Вероятность вынужденного излучения равна  $B_{10} \cdot U_\omega$ . Число фотонов увеличивается на единицу. В отличие от спонтанного процесса, при котором фотоны испускаются различными атомами независимо друг от друга, при вынужденном излучении новый фотон неотличим по своим свойствам от фотона, вызвавшего переход. Все фотоны, возникшие в результате вынужденного излучения, имеют одинаковую частоту, фазу, направление распространения и поляризацию. Таким образом, вынужденное излучение *когерентно*.

Рассмотрим сначала спонтанное излучение, благодаря которому светятся обычные (нелазерные) источники света. Пусть в начальный момент времени  $t = 0$  в состояние было возбуждено  $N_{10}$  атомов (например, коротким импульсом тока). С вероятностью  $A_{10}$  атомы переходят в основное состояние, в результате чего к моменту  $t$  в возбужденном состоянии остается  $N_1$  атомов. За время  $dt$  спонтанный переход совершат в среднем

$$dN_{10} = A_{10}N_1 dt \quad (1.22)$$

атомов. Соответственно изменение числа атомов на верхнем уровне равно  $dN_1 = -dN_{10} = -A_{10}N_1 dt$ . Интегрируя, получаем, что число возбужденных атомов убывает по экспоненциальному закону

$$N_1(t) = N_{10} \exp(-A_{10}t). \quad (1.23)$$

Интенсивность спонтанного излучения пропорциональна числу испущенных фотонов, то есть числу переходов. Из формул (1.23) и (1.22) получаем:

$$I(t) = I_0 \exp(-A_{10}t) = I_0 \exp(-t/\tau_1), \quad (1.24)$$

где  $\tau_1 = 1/A_{10}$  — радиационное время жизни уровня 1.

Формально выражение (1.24) совпадает с классической формулой излучения затухающего осциллятора с точностью до замены постоянной радиационного трения  $\gamma$  на коэффициент Эйнштейна  $A_{10}$ . Соответственно остается справедливым обсуждение вопроса о естественной ширине спектральной линии:  $\Delta\omega_{\text{анн}} = A_{10} = 1/\tau_1$ . Однако физический смысл времени жизни в классическом и квантовом случаях совершенно различен. По классической электродинамике все излучающие осцилляторы одновременно совершают затухающие колебания и время  $\tau$  одинаково для всех осцилляторов с данной частотой. По квантовым представлениям, спонтанные переходы происходят в случайные моменты времени, и понятие времени жизни имеет статистический смысл, применимый к большому ансамблю атомов. Кроме того, коэффициент Эйнштейна зависит от вида атомов и от того, в какое именно возбужденное состояние переведен атом. Времена жизни различных состояний могут различаться на много порядков, однако для большого количества спектральных линий справедлива оценка  $\tau \sim 10^{-8} \dots 10^{-9}$  с.

Статистический характер спонтанного излучения приводит к тому, что фазы, направления распространения и поляризации волн, испущенных разными атомами, не скоррелированы друг с другом — именно поэтому спонтанное излучение *некогерентно*.

Учтем теперь и вынужденное излучение. В состоянии термодинамического равновесия число переходов между уровнями  $1 \rightarrow 0$  должно равняться числу переходов  $0 \rightarrow 1$ , следовательно

$$N_1(A_{10} + B_{10}U_\omega) = N_0B_{01}U_\omega. \quad (1.25)$$

Равновесные населенности уровней связаны соотношением Больцмана

$$N_1/N_0 = \exp[-(W_1 - W_0)/(kT)] = \exp[-\hbar\omega/(kT)]$$

(чем больше энергия уровня, тем меньше его населенность).

Кроме того, при высокой температуре, когда плотность энергии высока, спонтанным излучением можно пренебречь, а населенности уровней

выравниваются, откуда следует, что  $B_{10} = B_{01}$ . Подставляя эти соотношения в формулу (1.25), для спектральной плотности равновесного теплового излучения получаем:

$$U_{\omega}(T) = \frac{A_{10}/B_{10}}{\exp[\hbar\omega/(kT)] - 1}. \quad (1.26)$$

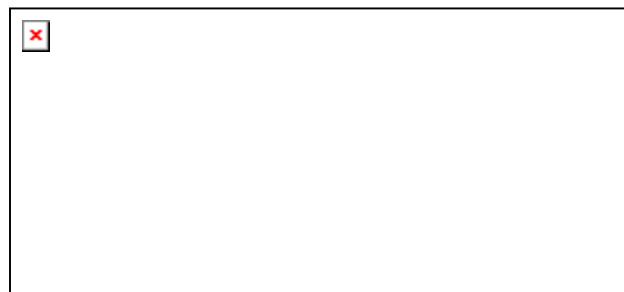
Это выражение совпадает с формулой Планка (1.19) при  $A_{10}/B_{10} = \hbar\omega^3/(\pi^2 c^3)$ .

## 1.4. Квантовые эффекты в оптике

Проявления квантовых свойств света отнюдь не исчерпываются тепловым излучением. В конце XIX — начале XX века были получены экспериментальные данные, которые могли быть интерпретированы только на основе квантовых представлений. Обсудим некоторые из них.

### Фотоэффект.

Испускание электронов веществом под действием света было открыто Г. Герцем еще в 1887 г. Схема наблюдения фотоэффекта показана на рис. 1.6, *а*. Свет, проникающий через кварцевое окошко, освещает фотокатод К. Под действием приложенного электрического напряжения электроны перемещаются к аноду А, в результате чего в цепи прибора течет ток, измеряемый амперметром.



**Рис. 1.6.** Фотоэффект (*а*) и вольтамперные характеристики фотоэлемента (*б*)

Вольтамперная характеристика, то есть зависимость фототока  $I$  от величины приложенного напряжения  $U$  показана на рис. 1.6, *б*. Видно, что при  $U = 0$  существует определенное количество электронов, обладающих достаточными скоростями, чтобы долететь до анода без помощи ускоряющего поля. С ростом  $U$  сила тока растет, однако затем наступает насыщение, связанное с тем, что все электроны, вылетевшие из катода, достигают анода. Величина тока насыщения  $I_{\text{нас}}$ , а, следовательно, и число вылетающих электронов, пропорциональны интенсивности света.

Для обращения силы тока в нуль нужно приложить задерживающее напряжение  $U_0$ . По этому напряжению можно определить максимальную скорость фотоэлектронов  $v_m$ :  $eU_0 = mv_m^2/2$ . Величина  $v_m$  не зависит от ин-

тенсивности света, а определяется только его частотой. Для каждого вещества существует минимальная пороговая частота излучения (максимальная длина волны  $\lambda_0$ ), при которой возникает фотоэффект. Если длина волны превышает эту *красную границу фотоэффекта*, то фотоэлектроны отсутствуют даже при достаточно большой интенсивности облучающего света.

Указанные закономерности противоречат классической теории, по которой энергия фотоэлектронов должна определяться интенсивностью света. В 1905 г. экспериментальные закономерности фотоэффекта были объяснены Эйнштейном на основе гипотезы о световых квантах. По этой теории энергия фотона  $\hbar\omega$  целиком передается электрону. Часть ее (так называемая *работа выхода A*) затрачивается на освобождение электрона из вещества, остаток определяет кинетическую энергию электрона. Таким образом, уравнение Эйнштейна для фотоэффекта, по сути представляющее закон сохранения энергии, имеет вид:

$$\hbar\omega = A + mv^2/2. \quad (1.27)$$

Красная граница фотоэффекта соответствует энергии фотона, равной работе выхода, т. е. нулевой кинетической энергии освобожденного электрона. Максимальная длина волны излучения, вызывающего фотоэффект, равна

$$\lambda_0 = 2\pi c\hbar/A. \quad (1.28)$$

Для большинства металлов  $\lambda_0$  лежит в ультрафиолетовой области, только у щелочных металлов красная граница попадает в видимый диапазон, поэтому именно они используются для покрытия фотокатодов.

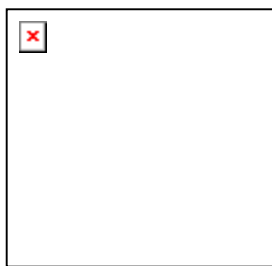
### Световое давление.

Давление света, впервые обнаруженное в опытах П. Н. Лебедева в 1900 г. может быть интерпретировано как результат передачи импульса фотонов поглощающей или отражающей стенке (рис. 1.7). Из теории относительности Эйнштейна следует, что фотон движется всегда со скоростью  $c$ , имеет нулевую массу покоя и импульс, равный

$$p = \hbar\omega/c \quad (1.29)$$

При нормальном падении каждый поглощенный фотон передает стенке импульс  $p$ , отраженный —  $2p$ . При коэффициенте отражения  $R$ , из общего потока в  $N$  фотонов отразится  $NR$  частиц, а  $N(1 - R)$  поглотится. Число фотонов, попавших на поверхность за единицу времени, может быть выражено через объемную плотность излучения:

$$N\hbar\omega = Uc. \quad (1.30)$$



**Рис. 1.7.** Световое давление

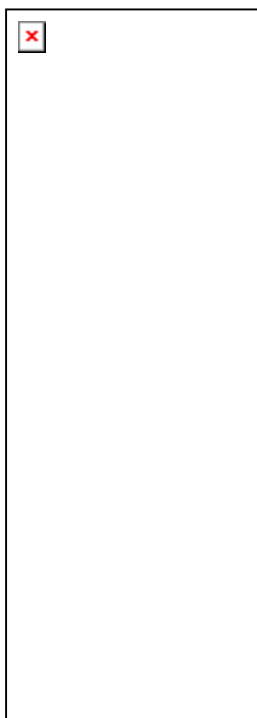
Из формул (1.29) и (1.30) получаем для переданного стенке импульса, то есть для величины светового давления  $P$  соотношение

$$P = U(1 + R). \quad (1.31)$$

Интересно, что точно такое же выражение получается и в чисто классической модели как результат взаимодействия электрического и магнитного полей волны с зарядами в веществе. В последнем случае сила светового давления выражается через силу Лоренца, действующую на заряды, ускоренные электрическим полем световой волны, со стороны магнитного поля той же волны.

### Эффект Комптона

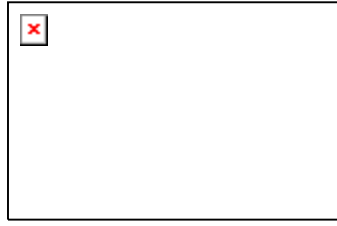
В 1923 г, было обнаружено, что при рассеянии рентгеновского излучения с длиной волны  $\lambda_0$  на мишени из вещества с небольшим атомным номером появляется спектральная компонента, смещенная в сторону длинных волн. Величина смещения зависит от угла рассеяния (рис. 1.8).



**Рис. 1.8.** Спектральный сдвиг при комптоновском рассеянии рентгеновских лучей

Элементарная теория этого эффекта рассматривает упругое рассеяние фотона на электроне (рис. 1.9).





**Рис. 1.9.** Эффект Комптона как рассеяние фотона на электроне

В атомах легких элементов энергия связи электрона около  $10 \text{ эВ}$ , что на несколько порядков меньше энергии рентгеновского фотона ( $\sim 10 \text{ кэВ}$ ), поэтому электроны в этих опытах можно считать практически свободными. Запишем законы сохранения энергии и импульса при упругом ударе:

$$\begin{cases} \hbar\omega = \hbar\omega' + p^2/2m \\ \hbar\mathbf{k} = \hbar\mathbf{k}' + \mathbf{p} \end{cases}, \quad (1.32)$$

где  $\hbar\mathbf{k}$  и  $\hbar\mathbf{k}'$  — импульс фотона до и после столкновения,  $p$  — импульс электрона после удара. По теореме косинусов из второго уравнения (1.32) находим

$$p^2 = (\hbar k)^2 + (\hbar k')^2 - 2\hbar^2 k k' \cos \theta.$$

Подставляя в это выражение квадрат импульса электрона из закона сохранения энергии и учитывая, что  $k = \omega/c$ , получаем:

$$2m\hbar(\omega - \omega') = (\omega^2 + \omega'^2 - 2\omega\omega' \cos \theta) \hbar^2 / c^2. \quad (1.33)$$

Поскольку  $\hbar\omega/mc^2 \ll 1$ , изменение частоты  $\Delta\omega = \omega' - \omega \ll \omega$ , а  $\Delta\lambda/\lambda = -\Delta\omega/\omega$ , из (1.33) окончательно получаем, что изменение длины волны равно

$$\Delta\lambda = 2 h/(mc) \sin^2 (\theta/2) = 2\Lambda \sin^2 (\theta/2). \quad (1.34)$$

Входящая в (1.34) константа  $\Lambda = h/(mc) = 0,00246 \text{ нм}$  называется *комptonовской длиной волны электрона*.

Таким образом, в ряде эффектов (интерференция, дифракция) свет проявляет себя как электромагнитная волна, в других случаях (фотоэффект, эффект Комптона) — как поток фотонов. Это — проявления так называемого *корпускулярно-волнового дуализма*, который присущ всем микрочастицам и находит свое объяснение в рамках квантовой механики.

## Глава 2. Модель атома Резерфорда-Бора

### 2.1. Опыты Резерфорда

К концу XIX века стало ясно, что атом (по-гречески *неделимый*) на самом деле является сложной системой. Особенно этому способствовали несколько открытий, сделанных на рубеже XIX и XX веков. В 1897 г. английский физик Дж. Дж. Томсон, изучая поведение заряженных частиц, образующихся при электрическом разряде в газах, обнаружил, что в состав любого атома входит одна и та же отрицательно заряженная частица, впоследствии названная электроном. В 1896 г. французский физик А. Беккерель открыл явление естественной радиоактивности, то есть самопроизвольного испускания некоторыми веществами проникающего излучения. В течение нескольких последующих лет было выяснено, что существует три вида радиоактивного излучения, которые назвали  $\alpha$ -,  $\beta$ - и  $\gamma$ -лучами, и были исследованы свойства частиц составляющих эти виды излучения. В 1902 г. английские ученые Э. Резерфорд и Ф. Содди обнаружили, что одновременно с радиоактивностью происходит превращение одних химических элементов в другие.

В 1901 г. Ж. Перрен высказал предположение о ядерно-планетарном устройстве атома. Подобная модель была разработана в 1904 г. японским физиком Х. Нагаока. По этой модели основную часть объема атома занимает массивный положительный заряд, вокруг которого на круговой орбите через определенные интервалы располагаются электроны. Несмотря на качественное и частично количественное согласие с экспериментом для предсказываемых оптических спектров, эта модель вначале не получила особого развития, так как по законам классической электродинамики такой атом не может быть стабилен.

Другую гипотетическую модель внутреннего строения атома в 1902 году предложил лорд Кельвин. В дальнейшем ее активно отстаивал Дж. Дж. Томсон, поэтому она получила название томсоновской модели атома. Согласно этой модели положительный заряд и масса атома равномерно распределены по объему шара диаметром около  $3 \text{ \AA}$  ( $1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ м}$ ). Электроны, масса которых значительно меньше массы атома, как бы вкраплены в этот шар. Положительный заряд шара компенсируется отрицательным зарядом электронов, так что в целом атом нейтрален. Эта модель получила неофициальное название «пудинг с изюмом». Томсон теоретически исследовал равновесные распределения электронов в таком атоме и пришел к выводу о возможной периодичности атомных свойств, что качественно совпадало с результатами наблюдений. Колебания электронов около положений равновесия в соответствии с законами электродинамики должны были сопровождаться излучением электромагнитных волн, частоты которых были близки к реально наблюдавшимся. Размеры атома Том-

сона хорошо согласовывались с результатами исследований газокинетических явлений (диффузии, теплопередачи и др.)

Существенное продвижение в экспериментальном исследовании строения атомов стало возможным благодаря открытию элемента радия в 1898 г. французскими физиками Пьером Кюри и Марией Кюри-Склодовской. Излучение радия имеет примерно в миллион раз большую интенсивность, чем излучение урана. Радий и его соли являются мощными источниками  $\alpha$ -частиц, которые представляют собой дважды ионизованные атомы гелия (He) с массой  $m_\alpha = 7296 m_e$  и положительным зарядом  $q_\alpha = 2e$  ( $m_e$  — масса электрона,  $e$  — элементарный заряд)<sup>1</sup>. Скорость испускаемых радием  $\alpha$ -частиц равна  $v \sim 1,5 \cdot 10^7$  м/с.

В 1908 – 1913 гг. Э. Резерфорд с сотрудниками Г. Гейгером и Э. Марсденом провели исследование рассеяния  $\alpha$ -частиц тонкой фольгой из разных металлов. Схема одного из опытов представлена на рис. 2.1. Узкий пучок частиц, испущенных радиоактивным веществом Р (радием или его солями) падал на фольгу Ф. Рассеянные  $\alpha$ -частицы попадали на экран Э, покрытый сернистым цинком. Возникающие при этом вспышки (сцинтилляции) наблюдались в микроскоп М. При этом было обнаружено, что подавляющая часть  $\alpha$ -частиц отклоняется на небольшие углы порядка  $1 - 3^\circ$ , однако некоторое их количество рассеивается на значительно большие углы, достигающие до  $150^\circ$ . Покажем, что этот результат противоречит модели атома Томсона.



Рис. 2.1. Опыт Резерфорда

Кулоновская сила взаимодействия  $\alpha$ -частицы с положительным зарядом атома равна  $F = \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 R^2}$ , где  $Ze$  — положительный заряд атома,  $R$  — эффективное расстояние взаимодействия. Под действием этой силы импульс частицы может измениться на величину  $\Delta p = F\Delta t$ , где  $\Delta t = 2R/v$  — время взаимодействия. Таким образом, для относительного изменения импульса при рассеянии на одном атоме, полагая  $R$  порядка размера атома ( $10^{-10}$  м), получаем оценку:

$$\frac{\Delta p}{p} = \frac{Ze^2}{\pi\epsilon_0 R m_\alpha v^2} \approx 3 \cdot 10^{-4},$$

что соответствует углу рассеяния  $0,02^\circ$



Рис. 2.2. Рассеяние  $\alpha$ -частиц атомами

<sup>1</sup>  $m_e = 9,1 \cdot 10^{-31}$  кг,  $e = 1,6 \cdot 10^{-19}$  Кл.

(рис. 2.2). Вероятность же рассеяния на углы, большие  $90^\circ$  (в этом случае рассеяние должно произойти на многих атомах), оказывается исчезающе малой — на уровне  $10^{-3500}$ . Учет взаимодействия  $\alpha$ -частицы с электронами может только уменьшить найденную оценку.

Поскольку угол отклонения обратно пропорционален размеру рассеивателя  $R$ , получить заметное отклонение  $\alpha$ -частиц при однократном рассеянии можно лишь если  $R \sim 10^{-14}$  м. Основываясь на этом, Резерфорд выдвинул *планетарную модель* атома: в центре атома находится ядро, вокруг которого, как планеты вокруг Солнца, вращаются  $Z$  электронов. Размер ядра не больше  $10^{-14}$  м, оно несет положительный заряд  $Ze$  и в нем сосредоточена почти вся масса атома. Резерфорд теоретически рассчитал, как зависит интенсивность рассеяния от угла отклонения  $\alpha$ -частиц, зарядового числа ядра и скорости рассеиваемых частиц. Экспериментально измеренные зависимости оказались в полном соответствии с этими теоретическими предсказаниями.

Модель Резерфорда объясняла результаты опытов по рассеянию  $\alpha$ -частиц, однако противоречила классической электродинамике. Действительно, электроны, для того чтобы не упасть на ядро, должны все время двигаться и, поскольку их траектория ограничена в пространстве, двигаться с ускорением. Например, при движении по круговой траектории электрон будет иметь центростремительное ускорение. По законам электродинамики ускоренно движущийся заряд должен излучать электромагнитные волны. Процесс излучения сопровождается потерей энергии, так что электрон должен был бы, в конце концов, упасть на ядро. Оценки, сделанные для модели Резерфорда, показали, что для электрона, первоначально вращавшегося по круговой орбите радиусом  $1 \text{ \AA}$ , падение на ядро происходило бы за время около  $10^{-7}$  секунды. При этом такое падение сопровождалось бы излучением электромагнитных волн со сплошным спектром. Реальные же уединенные атомы излучают волны с линейчатым спектром, и в отсутствии внешних воздействий в некотором (основном) состоянии «живут», не разрушаясь, неограниченно долго. Это противоречие было разрешено позже в рамках квантовой механики.

## 2.2. Постулаты Бора. Опыт Франка и Герца

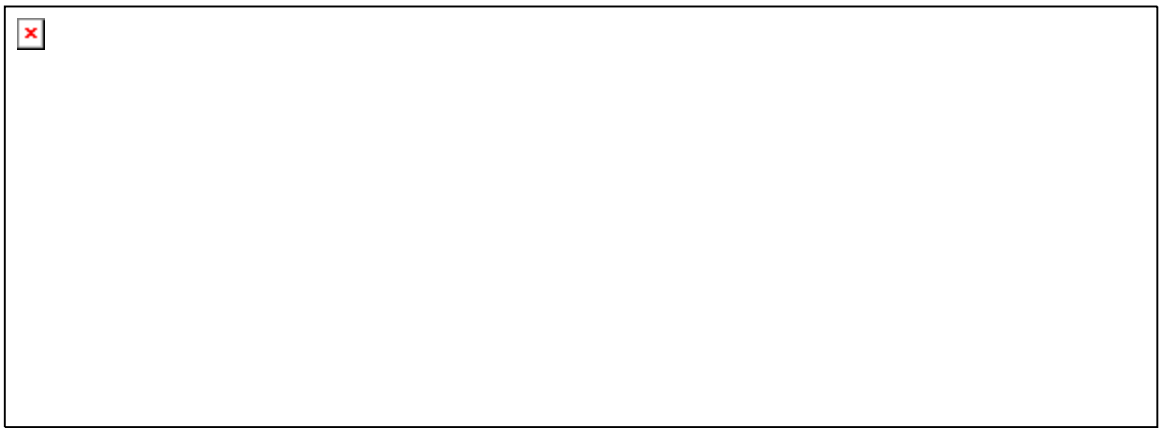
Дальнейшее развитие теории строения атома связано с двумя постулатами, которые выдвинул датский физик Нильс Бор в теоретической работе 1913 г.:

- *Из бесконечного множества электронных орбит, возможных с точки зрения классической механики, в действительности реализуются только некоторые дискретные стационарные орбиты, удовлетворяющие определенным условиям. Электрон, находящийся на такой стационарной орбите, имеет определенную энергию и не излучает.*

В дальнейшем, когда выяснилось, что понятие траектории электрона в атоме теряет смысл, такую ситуацию, когда движущийся в ограниченной области пространства электрон имеет определенную энергию и не излучает, стали называть стационарным состоянием электрона, а условия выбора стационарных орбит (состояний) — квантовыми условиями.

- *Излучение испускается или поглощается в виде светового кванта с круговой частотой  $\omega$  и энергией  $\hbar\omega$  при скачкообразном переходе электрона из одного стационарного состояния в другое. Пусть  $n$  и  $m$  — номера состояний, между которыми совершается переход, тогда энергия кванта равна разности энергий электрона в этих состояниях:*

$$\hbar\omega = E_n - E_m. \quad (2.1)$$



**Рис. 2.3.** Опыт Франка – Герца с парами ртути.

Дискретность (квантованность) энергии у атомов была подтверждена опытами Дж. Франка и Г. Герца (рис. 2.3, *а*), проделанными уже в следующем 1914 г. В одном из опытов исследовалось прохождение электрического тока через трубку, заполненную парами ртути. Вылетевшие из катода К электроны ускорялись напряжением  $U$ , приложенным между катодом и управляющим электродом — сеткой С. Это напряжение регулировалось потенциометром П и измерялось вольтметром В. Между сеткой и анодом А создавалось слабое задерживающее электрическое поле с напряжением  $U_3 \ll U$ . Если кинетическая энергия электронов, прошедших через сетку, была достаточно велика, они достигали анода, и возникающий ток регистрировался гальванометром Г.

Если бы в трубке был вакуум, вольтамперная характеристика имела бы вид, показанный на рис. 2.3, *б*. Однако при наличии паров ртути на кривой  $I(U)$  возникали максимумы и минимумы (рис. 2.3, *в*). Объяснение этого эффекта заключается в следующем.

Пока энергия электрона невелика (небольшие значения  $U$ ) при столкновениях электрона с атомом ртути внутренняя энергия атома не меняется, так как из-за дискретного характера энергетических уровней возбуждение невозможно. Такое столкновение называется *упругим*. Энергия электрона при упругом столкновении также почти не меняется, поскольку атом ртути

почти в 400 тысяч раз тяжелее электрона, и передачи кинетической энергии при столкновении практически не происходит. После упругих столкновений электроны способны преодолеть задерживающее напряжение между сеткой и анодом. С ростом напряжения  $U$  количество электронов, достигающих анода, возрастает, — анодный ток растет.

По достижении электроном энергии 4,9 эВ (разность энергий первого возбужденного и основного состояний атома ртути) ситуация меняется. Становится возможным *неупругое* столкновение, при котором электрон передает часть своей кинетической энергии атому, переводя его в возбужденное состояние. Оставшейся у электрона энергии оказывается недостаточно для преодоления задерживающего напряжения на участке сетка – анод и он не долетает до анода. В этой ситуации при увеличении  $U$  возрастает количество неупругих столкновений — уменьшается число электронов, достигающих анода, и анодный ток убывает. Последующие провалы на вольтамперной характеристике связаны с многократными неупругими столкновениями одного и того же электрона с атомами ртути. Расстояние по оси напряжений между двумя последовательными максимумами на графике 2.3, в равно потенциалу возбуждения атома ртути (4,9 В), а между максимумом и последующим минимумом приблизительно равно задерживающему напряжению сетка – анод.

Опыты Франка – Герца подтвердили и второй постулат Бора. При ускоряющем напряжении меньшем 4,9 В пары ртути не светятся. Это объясняется тем, что в трубке нет возбужденных атомов ртути, которые могли бы излучать свет, переходя в невозбужденное состояние. При напряжении более 4,9 В появляется свечение, спектр которого состоит из одной резонансной<sup>1</sup> ультрафиолетовой линии с  $\lambda = 253,7$  нм. По этой длине волны можно вычислить и потенциал возбуждения ртути:

$$eU = h\nu = hc/\lambda,$$

откуда  $U = 4,887$  В, что хорошо согласуется со значением 4,9 В, полученным выше. Замечательно также, что при  $U$ , незначительно превышающих 4,9 В, наблюдалась только одна резонансная линия, хотя спектр ртути содержит много линий излучения, для которых энергия светового кванта меньше 4,9 эВ.

## 2.3. Боровская теория атома водорода

Условие для стационарных орбит в атоме с одним электроном получил Бор, исходя из постулата Планка о том, что энергия возбужденного гармонического осциллятора принимает дискретные значения

$$E_n = n\hbar\omega, n = 1, 2, 3 \dots \quad (2.2)$$

---

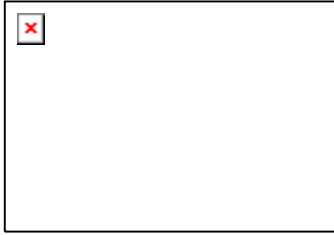
<sup>1</sup> Резонансная линия соответствует переходу между первым возбужденным и основным состояниями.

Из классической механики известно, что полная энергия осциллятора

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 q^2}{2}, \quad (2.3)$$

где  $q$  и  $p$  — координата и импульс осциллятора. Из (2.2) и (2.3) получаем уравнение, связывающее  $q$  и  $p$  в состоянии с номером  $n$ :

$$\frac{q^2}{2n\hbar/m\omega} + \frac{p^2}{2mn\hbar\omega} = 1. \quad (2.4)$$



**Рис. 2.4.** Фазовая траектория гармонического осциллятора

Координатная плоскость  $(q, p)$  называется *фазовой плоскостью*, а кривая, изображающая связь импульса и координаты на этой плоскости, — *фазовой кривой (фазовой траекторией)*. Из уравнения (2.4) следует, что фазовая кривая гармонического осциллятора представляет собой эллипс (рис. 2.4) с полуосями  $a = \sqrt{2n\hbar/m\omega}$  и  $b = \sqrt{2mn\hbar\omega}$ .

Площадь этого эллипса (площадь между фазовой траекторией и осью обобщенной координаты для одного периода) имеет определенное значение, зависящее только от номера состояния:

$$S = \oint pdq = \pi ab = 2\pi\hbar n. \quad (2.5)$$

Для движения электрона по плоской круговой орбите обобщенной координатой  $q$  является угол  $\varphi$ , а обобщенным импульсом  $p$  — момент импульса  $L$ . При движении в центральном поле, каковым является кулоновское поле ядра, момент импульса постоянен, а угол за период изменяется от 0 до  $2\pi$ . Поэтому площадь между фазовой траекторией и осью обобщенной координаты равна  $2\pi L$ . Подставляя это значение вместо интеграла в уравнение (2.5), получаем условие квантования для момента импульса:

$$L = n\hbar. \quad (2.6)$$

Таким образом, по теории Бора из всех орбит электрона, возможных с точки зрения классической механики, осуществляются только те, для которых момент импульса подчиняется условию (2.6), т. е. кратен постоянной  $\hbar$ .

Рассмотрим теперь электрон, движущийся по круговой орбите радиуса  $r$  вокруг атомного ядра с зарядом  $Ze$ . Масса ядра намного больше массы электрона, поэтому будем считать, что ядро покоится, и радиус орбиты электрона совпадает с расстоянием до ядра. При  $Z = 1$  такая модель описывает атом водорода, при  $Z = 2, 3, \dots$  — *водородоподобные ионы*, имеющие только один электрон:  $\text{He}^+$ ,  $\text{Li}^{++}$  и т. д. Центробежная сила, действующая на электрон, равна кулоновской силе притяжения:

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}. \quad (2.7)$$

Из уравнения (2.6), учитывая, что  $L = mvr$ , выразим скорость электрона  $v$  и подставим в (2.7). Тогда для радиусов стационарных орбит электрона получим:

$$r_n = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{mZe^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.8)$$

Радиус первой орбиты атома водорода называется *боровским радиусом*, его величина равна

$$a_0 = 4\pi\epsilon_0 \hbar^2 / me^2 = 0,529 \text{ \AA}. \quad (2.9)$$

По порядку величины боровский радиус совпадает с размерами атомов, которые получаются из газокинетических экспериментов. Это является дополнительным подтверждением теории Бора.

Напряженность электрического поля ядра на первой боровской орбите равна  $E = e/4\pi\epsilon_0 a_0^2 = 5 \cdot 10^{11}$  В/м. Вообще величина  $10^{11}$  В/м или  $10^9$  В/см является характерным масштабом для напряженностей внутриатомных электрических полей. Именно при таких напряженностях внешних полей возможна «холодная» ионизация атомов, т. е. отрыв внешних (наименее связанных с ядром) электронов.

## 2.4. Энергетические уровни водорода. Спектральные серии

Найдем, опираясь на теорию Бора, значения  $E_n$  энергии атома водорода в стационарных состояниях (разрешенные значения энергии). Будем считать, что потенциальная энергия свободного (не взаимодействующего с ядром) электрона равна нулю, тогда потенциальная энергия электрона на расстоянии  $r$  от ядра отрицательна и равна  $-Ze^2/4\pi\epsilon_0 r$ . Полная энергия движущегося по орбите электрона складывается из кинетической и потенциальной:

$$E = \frac{mv^2}{2} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}. \quad (2.10)$$

Выразив  $mv^2$  из (2.7), получим, что при движении по круговой орбите кинетическая энергия электрона по модулю вдвое меньше его потенциальной энергии, что означает достаточность кулоновских сил для удержания электрона на орбите. В этом случае полная энергия отрицательна и для вырывания электрона из атома требуется подвести энергию извне, так как энергия свободного электрона содержит только кинетическое слагаемое и не может быть отрицательной. Подставляя значения  $r$  из (2.8), находим разрешенные значения энергии:



$$E_n = -\frac{me^4 Z^2}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2}, n = 1, 2, \dots \quad (2.11)$$

Если ввести безразмерную величину

$$\alpha = e^2 / 4\pi\epsilon_0 \hbar c \approx 1/137, \quad (2.12)$$

называемую *постоянной тонкой структуры*, то энергия электрона в атоме выразится через энергию покоя электрона  $mc^2$ :

$$E_n = -Z^2 \alpha^2 mc^2 / 2n^2. \quad (2.13)$$

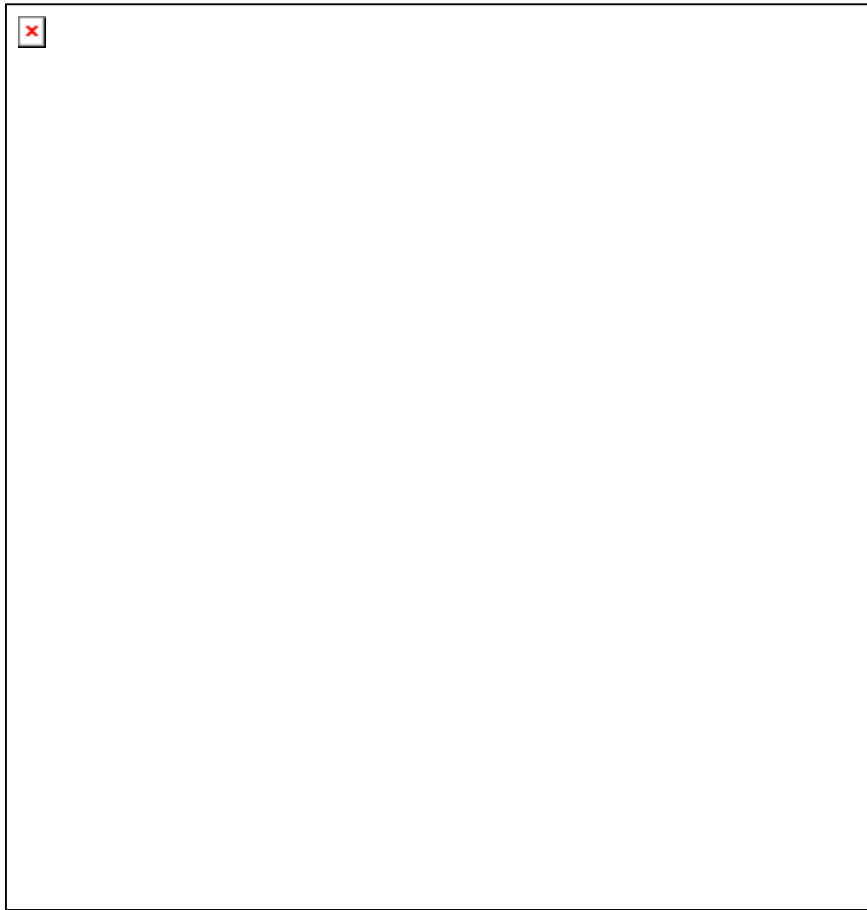
Полученное выражение позволяет сделать важные выводы, подтверждаемые экспериментальными наблюдениями.

1. Энергии стационарных состояний электрона в атоме водорода обратно пропорциональны квадратам натуральных чисел.

2. Энергия ионизации невозбужденного атома водорода, в котором электрон находится на первой боровской орбите, равна  $E_{\infty} = -E_1 = \alpha^2 mc^2 / 2 = 13,6 \text{ эВ}$ .

3. Потенциалы ионизации водородоподобных атомов увеличиваются прямо пропорционально квадрату заряда ядра  $Z$ .

Заметим, что скорость электрона на первой боровской орбите в атоме водорода равна  $v = \alpha c \approx c/137$ , а для других орбит она еще меньше. Поэтому электрон в атоме водорода можно считать нерелятивистским и применение нерелятивистского выражения для кинетической энергии в формуле (2.7) оказывается оправданным.



**Рис. 2.5.** Энергетические уровни и спектральные серии водорода

Схема энергетических уровней, определяемых формулой (2.11), показана на рис. 2.5. На ней отображены длины волн, соответствующие основным линиям первых серий излучения возбужденного атома водорода. Эмпирические формулы для расчета длин волн линий излучения различных веществ стали разрабатываться спектроскопистами еще за четверть века до боровской теории. Одна из таких формул, полученная для спектральных термов атома водорода (о них идет речь ниже) подтверждает пропорциональность энергии обратным квадратам натуральных чисел.

Еще в 1908 г. на основе обобщения экспериментальных данных был сформулирован *комбинационный принцип Ритца*: все многообразие волновых чисел спектральных линий атома может быть получено путем попарных комбинаций гораздо меньшего числа величин, названных *спектральными термами*. Волновое число<sup>1</sup> каждой спектральной линии выражается разностью двух термов:

$$\tilde{\nu} = T_m - T_n; \quad m < n. \quad (2.14)$$

Термы  $T_n$  данного атома представляют собой последовательность по-

---

<sup>1</sup> В спектроскопии принято использовать спектроскопическое волновое число  $\tilde{\nu} = \nu/c = 1/\lambda$ , отличающееся множителем  $2\pi$  от обычного волнового числа  $k = 2\pi/\lambda$ .

ложительных чисел, убывающих к нулю с ростом номера<sup>1</sup>  $n = 1, 2, \dots$ .

Заметим, что спектральные линии данного атома группируются в *спектральные серии*. Волновые числа линий одной серии при движении по спектру в сторону больших значений  $\tilde{\nu}$  сближаются между собой и стремятся к определенному значению  $\tilde{\nu}_{\infty}$ , которое называется границей серии. При наблюдении в обычной газоразрядной трубке интенсивность линий уменьшается с увеличением  $\tilde{\nu}$ . Комбинационный принцип объяснил сериальную структуру следующим образом. Волновые числа линий одной серии получаются комбинированием терма с определенным номером  $m$  и всех термов с более высокими номерами  $n = m + 1, m + 2, \dots$ . С ростом номера  $T_n \rightarrow 0$ , а волновые числа возрастают, стремясь к значению  $\tilde{\nu}_{\text{гр}} = T_m$ .

Для термов некоторых атомов были подобраны формулы, связывающие значение терма с его номером. В частности, термы атома водорода и водородоподобных ионов превосходно описываются формулой

$$T_n = \frac{R}{n^2}, \quad (2.15)$$

где величина  $R$  называется *постоянной Ридберга*. Значение постоянной Ридберга различно для разных изотопов водорода и водородоподобных ионов, поэтому ее снабжают индексом, указывающим на тип атома или иона. Например, для легкого водорода (протия) ее обозначают  $R_H$ .

Поскольку волновое число выражается через циклическую частоту:  $\tilde{\nu} = \omega/2\pi c$ , правило частот Бора (2.1) совпадает с формулой комбинационного принципа (2.14), если принять

$$T_n = -\frac{E_n}{2\pi\hbar c}. \quad (2.16)$$

При этом линии одной *спектральной серии* возникают при переходах атома с вышележащих энергетических уровней на один и тот же нижний уровень. Примеры таких переходов для атома водорода показаны на рис. 2.5. Из (2.16) с учетом (2.11) получается теоретическое выражение для термов водорода ( $Z = 1$ ):

$$T_n = \frac{R_{\infty}}{n^2}, \quad (2.17)$$

где

---

<sup>1</sup> Некоторые пары термов дают волновые числа, не наблюдаемые в эксперименте, поэтому в спектроскопии существуют еще и так называемые *правила отбора* для тех пар термов, разность которых дает волновые числа реально наблюдающихся спектральных линий.

$$R_{\infty} = \frac{me^4}{(4\pi)^3 \varepsilon_0^2 c \hbar^3} = 109737 \text{ нм}^{-1}; \quad R_{\infty} c = 3,288 \cdot 10^{15} \text{ н}^{-1}. \quad (2.18)$$

Индекс  $\infty$  указывает на то, что при выводе формул (2.11) и (2.18) масса ядра считалась бесконечно большой, а само ядро — неподвижным. Чтобы учесть конечность массы ядра  $M$  в (2.18) нужно заменить массу электрона  $m$  на приведенную массу  $Mm/(M + m)$ . В этом случае для легкого водорода рассчитанное значение постоянной Ридберга оказывается равным  $R_H = 109678 \text{ см}^{-1}$ , что отлично согласуется с экспериментальным значением. Для термов двух других изотопов водорода и водородоподобных ионов теория Бора также позволяет получить аналитические выражения и связать значения постоянной Ридберга со значениями других мировых постоянных.

Параметр  $n$  в формулах (2.11) – (2.17) называется *главным квантовым числом*<sup>1</sup>. Частота спектральной линии, соответствующей переходу между уровнями энергии с главными квантовыми числами  $n$  и  $m$  равна

$$\omega = 2\pi c R \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right). \quad (2.19)$$

Если зафиксировать число  $m$ , то при разных  $n > m$  из этой формулы получаются частоты линий одной *спектральной серии*. Серия с  $m = 1$  называется серией Лаймана. Для водорода ее линии лежат в УФ-диапазоне. Серия с  $m = 2$  (серия Бальмера) имеет четыре линии в видимой части спектра. Линии серии с  $m = 3$  (серии Пашена) попадают в ИК-область.

Линии этих и последующих серий наблюдаются в *излучении*, когда атомы в результате какого-либо внешнего воздействия (например, электрического разряда) переводятся в возбужденное состояние, и затем отдают свою энергию в виде световых квантов. В спектрах поглощения наблюдаются только линии серии Лаймана, поскольку при обычных температурах подавляющее число атомов находится в основном состоянии ( $m = 1$ ).

Теория Бора показала, что для понимания законов микромира классических законов недостаточно. В этой теории возникли понятия стационарного состояния и квантового числа. Ее серьезным успехом оказалось объяснение комбинационного принципа Ритца и эмпирических серийных соотношений в спектре водорода и водородоподобных ионов. Она позволила объяснить закономерности в изменении спектров некоторые атомы, помещенных в магнитное поле (простой эффект Зеемана). Однако, поскольку теория Бора не являлась последовательно квантовой теорией (расчет движения электронов на квантовых орбитах производился по формулам классической физики), с ее помощью не удалось адекватно описать

<sup>1</sup>Обобщение теории Бора-Зоммерфельда для эллиптических орбит показало, что квантовых чисел может быть несколько.

спектры атомов с двумя и более электронами — He и т. д. Не позволила она также получить количественные соотношения для интенсивностей спектральных линий и, в частности, объяснить спектроскопические правила отбора.

## Глава 3. Волновые свойства вещества

### 3.1. Волны де Бройля

К двадцатым годам прошлого века было известно, что в одних явлениях (интерференция, дифракция) свет проявляет волновые свойства, в других (фотоэффект, эффект Комптона) ведет себя как поток частиц. В 1924 г. французский ученый *Луи де Бройль* выдвинул гипотезу о том, что подобный *корпускулярно-волновой дуализм* не является особенностью только оптических явлений, но имеет универсальный характер, а микро-частицы наряду с корпускулярными обладают также и волновыми свойствами. Причем волновые свойства (частота  $\omega$ , длина волны  $\lambda$  и волновой вектор  $\mathbf{k}$ ) связаны с корпускулярными (энергией  $E$  и импульсом  $\mathbf{p}$ ) теми же соотношениями, что и у фотона:

$$\omega = \frac{E}{\hbar}, \quad \lambda = \frac{2\pi\hbar}{p}, \quad \mathbf{k} = \frac{\mathbf{p}}{\hbar}. \quad (3.1)$$

Функцию координат и времени, описывающую волновые свойства частицы в данном состоянии, называют *волновой функцией*, или  *$\psi$ -функцией состояния*. При свободном движении микро-частицы ее вектор импульса и энергия не изменяются, следовательно, постоянны также  $\omega$ ,  $\lambda$  и  $\mathbf{k}$ . Такими свойствами обладает плоская волна, распространяющаяся вдоль направления импульса частицы

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \exp[i(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r})] = \exp\left[\frac{i}{\hbar}(Et - \mathbf{p}\mathbf{r})\right]. \quad (3.2)$$

Де Бройль использовал волновые представления для пояснения правила квантования электронных орбит Бора. Электрону в стационарном состоянии сопоставляется круговая стоячая волна со стационарным распределением амплитуды вдоль орбиты. Такое распределение возможно, только если на орбите укладывается целое число длин волн. Таким образом, условие стационарности имеет вид  $2\pi r/\lambda = n$  ( $n = 1, 2, \dots$ ). Учитывая соотношение (3.1) и то, что  $L = rp$  есть момент импульса, получаем  $L = n\hbar$ , что совпадает с условием квантования (1.6).

Физическую интерпретацию волновой функции дал *Макс Борн* в 1926 г. Согласно Борну квадрат модуля волновой функции определяет вероятность  $dP$  того, что частица в данном состоянии будет обнаружена в объеме  $dV$  вблизи точки с радиус-вектором  $\mathbf{r}$ :

$$dP = A |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 dV = A \psi \psi^* dV, \quad (3.3)$$

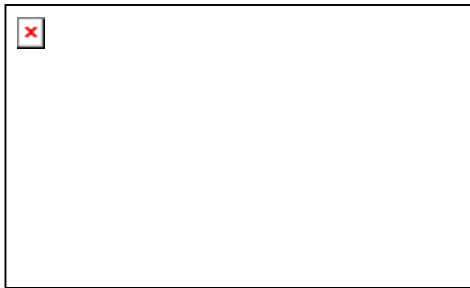
где  $A$  — множитель, одинаковый для всех  $\mathbf{r}$ . Интеграл от выражения (3.3), взятый по всему объему, должен равняться единице, так как обнаружение частицы хоть в какой-нибудь точке является достоверным событием. В

квантовой механике принимается, что  $\psi$ -функция допускает умножение на произвольное отличное от нуля комплексное число  $C$ , причем функции  $\psi$  и  $C\psi$  описывают одно и то же состояние частицы. Поэтому всегда можно выбрать  $\psi$ -функцию так, чтобы она удовлетворяла условию

$$\int |\psi|^2 dV = 1. \quad (3.4)$$

Условие (3.4) называется *условием нормировки*, а соответствующая волновая функция — *нормированной*. Для такой функции множитель  $A$  в формуле (3.3) равен единице.

Как известно, при распространении световых волн в среде возникает явление *дисперсии* — зависимости скорости распространения от длины волны или частоты. Дисперсия свойственна также волнам де Бройля, причем она существует даже в вакууме.



**Рис. 3.1.** Волновой пакет

При наличии дисперсии необходимо различать *фазовую скорость* волны (скорость перемещения волнового фронта)  $v_\phi = \omega/k$  и *групповую скорость* (скорость перемещения максимума огибающей амплитудно-модулированного волнового пакета, рис. 3.1)  $u = d\omega/dk$ . В случае волн де Бройля максимум амплитуды пакета соответствует точке, в которой вероятность

обнаружения частицы максимальна. С учетом соотношений (3.1), выражения для фазовой и групповой скоростей дебройлевского волнового пакета частицы примут вид

$$v_\phi = \frac{E}{p}, \quad u = \frac{dE}{dp}. \quad (3.5)$$

В нерелятивистском случае кинетическая энергия классической частицы связана с импульсом формулой  $E = p^2/2m$ , поэтому  $u = dE/dp = p/m = v$ , где  $v$  — скорость классической частицы. Таким образом, групповая скорость дебройлевского волнового пакета совпадает со скоростью классической частицы, или, другими словами, место наиболее вероятного пребывания частицы перемещается со скоростью классической частицы. В релятивистском случае по теории Эйнштейна имеем

$$E = \sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4} = mc^2, \quad ,$$

где  $m_0$  — масса покоя частицы, а  $m$  — так называемая релятивистская масса. Групповая скорость оказывается равной

$$u = \frac{c^2 p}{E}. \quad (3.6)$$

Так как  $E = mc^2$ ,  $p = mv$ , получаем вновь  $u = v$ . Из (3.6) и (3.5) видно, что между групповой и фазовой скоростями существует простая связь:

$$uv_{\phi} = c^2. \quad (3.7)$$

Поскольку всегда  $v = u \leq c$ , оказывается, что фазовая скорость волн вероятности больше скорости света. Однако поскольку фазовая скорость не связана с передачей информации или с перемещением какого-либо физического объекта, теория относительности не накладывает на нее никаких ограничений. Наблюдаемой физической величиной является групповая скорость.

### 3.2. Проявления волновых свойств вещества

Оценим длины волн де Бройля, соответствующих различным микро-частицам. Для электронов, ускоренных разностью потенциалов  $U$ , импульс определяется формулой  $p = \sqrt{2m_e eU}$ , так что из (3.1) следует, что

$$\lambda_e = 2\pi\hbar / \sqrt{2m_e eU}. \quad (3.8)$$

При  $U = 100 \dots 1000$  В получаем  $\lambda_e = 0,12 \dots 0,04$  нм. Для молекул водорода, движущихся со среднеквадратичной тепловой скоростью,  $p = \sqrt{3m_{H_2} kT}$ ; при  $T = 320$  К находим, что  $\lambda_{H_2} = 0,1$  нм. Таким образом, для электронов, ускоренных до энергий  $100 \dots 1000$  эВ и молекул легких газов при комнатной температуре длины волн де Бройля такого же порядка, что и у мягкого рентгеновского излучения. Поэтому можно обнаружить дифракцию этих волн теми же методами, которые применяются в физике рентгеновских лучей.

Дифракционные эффекты для рентгеновского излучения особенно заметны при его взаимодействии с кристаллическими телами. Постоянные кристаллических решеток, как правило, по величине равны нескольким десятым нанометра и, следовательно, сопоставимы с длинами волн рентгеновских лучей. При рассеянии рентгеновских лучей на кристаллах наблюдаются дифракционные максимумы, положение которых определяется условием Вульфа – Брэггов

$$2d \sin \theta = n\lambda, \quad (3.9)$$

где  $d$  — расстояние между кристаллическими плоскостями, т. е. период решетки (см. рис. 3.2),  $\theta$  — угол скольжения лучей, равный половине угла отклонения  $\varphi$ .





**Рис. 3.2.** Дифракция волн на кристаллической решетке

В 1927 г. Дэвиссон и Джермер, исследуя отражение электронного пучка от монокристалла никеля (см. рис. 3.3, *а*), обнаружили резкое увеличение числа рассеянных электронов под углом  $\alpha = 50^\circ$  (рис. 3.3, *б*), особенно ярко выраженное при ускоряющем напряжении 54 В ( $\lambda = 0,167$  нм). Этот максимум можно истолковать как дифракцию первого порядка на решетке с периодом  $d = \lambda / \sin \theta = 0,215$  нм, что хорошо согласуется с известным расстоянием между кристаллическими плоскостями никеля.

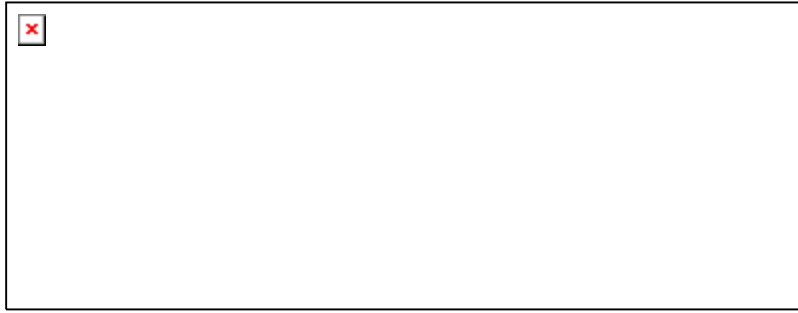


**Рис. 3.3.** Схема опыта Дэвиссона и Джермера (*а*) и полярная диаграмма рассеяния электронов (*б*)

При фиксированном положении коллектора и плавном увеличении напряжения на электронной пушке будет увеличиваться импульс электрона, а, следовательно, уменьшаться длина волны де Бройля. С учетом (3.8) и (3.9) получаем, что дифракционные максимумы будут возникать при ускоряющих напряжениях

$$\sqrt{U} = \frac{2\pi n \hbar}{2d \sin \theta \sqrt{2m_e e}}. \quad (3.10)$$

В опытах Дэвиссона и Джермера была получена зависимость, приведенная на рис. 3.4, стрелками показано положение максимумов, рассчитанное по формуле (3.10). Расстояние между ними при  $\theta = 80^\circ$  и  $d = 0,203$  нм должно равняться  $3,06 \text{ В}^{1/2}$ .



**Рис. 3.4.** Зависимость интенсивности рассеянного пучка электронов от ускоряющего напряжения

Видно, что при общем качественном согласии теории и эксперимента, для малых  $n$  наблюдаются систематические отступления от формулы (3.10), что объясняется преломлением волн де Бройля на границе кристалла и уменьшением длины волны вследствие влияния внутрикристаллического поля.

В других дифракционных опытах Тартаковским и Томсоном изучалась дифракция монохроматического пучка АВ быстрых электронов с энергией порядка  $10^4$  эВ на поликристаллической металлической фольге Ф (рис. 3.5, а).



**Рис. 3.5.** Схема опыта Тартаковского и Томсона (а, б) и электронная дифракционная картина (в)

Поликристаллическая фольга состоит из множества хаотически ориентированных кристалликов, среди которых найдутся такие, при отражении от которых выполняется условие Вульфа – Брэггов  $2d \sin \theta = n\lambda$  (рис. 3.5, б). Совокупность таких кристалликов обладает симметрией вращения относительно направления падающего электронного пучка АВО. В результате на экране Э образуются дифракционные кольца (рис. 3.5, в).

В описанных выше опытах интенсивность электронных пучков была настолько велика, что на кристаллах одновременно рассеивалось большое число электронов. Поэтому можно было предположить, что дифракционная картина возникает в результате взаимодействия этих электронов друг с другом. В 1949 г. Биберманом, Сушкиным и Фабрикантом был поставлен опыт, в котором интенсивность электронного пучка была настолько слаба, что интервал между двумя последовательными электронами в 30000 раз

превосходил время, затрачиваемое на прохождение всего прибора. Направление рассеяния отдельного электрона было случайным, но результирующее распределение от большого числа частиц статистически воспроизводилось и соответствовало описанной выше дифракционной картине. Таким образом было доказано, что волновые свойства присущи отдельной микрочастице.

Поведение микрообъектов, сочетающих свойства волн и частиц, чрезвычайно сильно отличается от поведения больших тел. Действительно, частица всегда обнаруживается как неделимое целое, в то время как волну можно разделить на части, скажем, с помощью полупрозрачного зеркала. Во многих случаях это поведение противоречит повседневному опыту человека. Это приводит к тому, что наглядные модели поведения квантовых объектов можно использовать далеко не всегда, да и то с большими оговорками.



**Рис. 3.6.** Опыт с двумя щелями (*а*) и распределение вероятности детектирования электронов при открытых 1 и 2 щели по очереди (*б*) и одновременно (*в*)

Рассмотрим, например, что получится при падении монокинетического<sup>1</sup> пучка невзаимодействующих между собой электронов на непрозрачный экран с двумя щелями (рис. 3.6, *а*). За преградой поставим фотопластинку Фп.

В начале оставим открытой только щель 1, почернение фотопластинки будет характеризоваться кривой 1 на рис. 3.6, *б*. Для одного электрона эта кривая описывает вероятность его детектирования в плоскости Фп. Аналогично, при прохождении электронов через вторую щель получим распределение 2. Ширина этих дифракционных контуров, как и в классической волновой оптике, обратно пропорциональна ширине щелей *b*.

Если же открыть обе щели, то фотопластинка зафиксирует не наложение кривых 1 и 2, а типичную интерференционную картину (рис. 3.6, *в*) с периодом, обратно пропорциональным расстоянию между щелями *d*. Таким образом, на движение каждого электрона (как волны) оказывают влияние оба отверстия. Любая попытка установить, через какое именно отверстие проходит электрон (как частица) приводит к исчезновению интерференционных полос.

<sup>1</sup> Монокинетический пучок — пучок частиц, имеющих одинаковую скорость.

Описанный мысленный эксперимент показывает, что характер движения микрочастиц не совместим с представлением об определенной траектории. Он носит вероятностный характер и не существует способа предсказать, в какую именно точку экрана попадет конкретный электрон. Можно только утверждать, что попадание в одни точки более вероятно, чем в другие. Соответствующая вероятность определяется квадратом модуля волновой функции  $|\psi|^2$ .

Статистические или вероятностные свойства микрообъекта при некоторых заданных условиях могут быть установлены на опыте либо при наблюдении большого количества идентичных объектов (частиц), либо при многократном наблюдении одного объекта в одних и тех же условиях. Такие совокупности объектов называются квантовыми ансамблями. Каждый квантовый ансамбль определяется заданием макроскопических параметров его состояния.

Здесь имеется некоторая аналогия с классической статистической физикой. Например, задавая давление и температуру газа, мы определяем распределение его молекул по координатам и скоростям. Однако если в классическом случае допускается принципиальная возможность проследить за движением отдельно взятой молекулы, то для квантовых микрообъектов такой подход лишен физического смысла.

### 3.3. Соотношение неопределенностей

В классической механике состояние материальной точки (частицы) определяется заданием координаты, импульса, энергии и т. д. Причем все эти величины могут быть в принципе одновременно измерены с любой требуемой точностью. Своеобразие корпускулярно-волновых свойств микрочастиц проявляется в том, что не для всех величин возможны одновременные точные измерения.

Рассмотрим, например, процедуру определения поперечной координаты свободно летящей частицы путем фиксации ее прохождения через щель шириной  $\Delta x$  в экране  $\mathcal{E}$  (рис. 3.7). Предположим, что пучок идентичных невзаимодействующих частиц летит перпендикулярно плоскости щели так, что их импульс  $\mathbf{p}$  направлен вдоль оси  $z$ . Следовательно, достоверно известно, что проекция  $p_x = 0$ . При этом отсутствует какая-либо информация о положении частицы по направлению  $x$  (координата  $x$  полностью неопределена). После прохождения щели неопределенность координаты становится равной  $\Delta x$ . Одновременно вследствие волновых свойств частиц, они испытывают дифракцию, отклоняются от первоначального направления и поперечная проекция импульса приобретает неопределенность  $\Delta p_x$ . Считая, что основная доля частиц попадает в пределы центрального дифракционного максимума с угловой шириной  $\sin \varphi = \Delta p_x / p = \lambda / \Delta x$ , с учетом (3.1) получаем:

$$\Delta x \Delta p_x \geq 2\pi\hbar. \quad (3.11)$$

Соотношение (3.11), установленное в 1927 г., называется *соотношением неопределенности Гейзенберга* для координаты и импульса частицы. Оно является одним из принципиальных ограничений классического описания частицы. Из него следует, что чем точнее известна координата, тем больше неопределенность импульса частицы. Верно и обратное: при уточнении значения проекции импульса происходит возрастание неопределенности координаты. Соотношение Гейзенберга не означает, что частица в каждый момент времени имеет определенные значения координаты и импульса, а мы просто не можем измерить их с достаточной точностью. Американским ученым Дж. фон Нейманом в 1932 г. было показано, что предположение о наличии «скрытых параметров», задающих точные (но неизвестные) положение и импульс электрона, противоречит опыту. Таким образом, в природе *объективно не существует* состояний частиц с одновременно точно определенными значениями координаты и соответствующей проекции импульса.

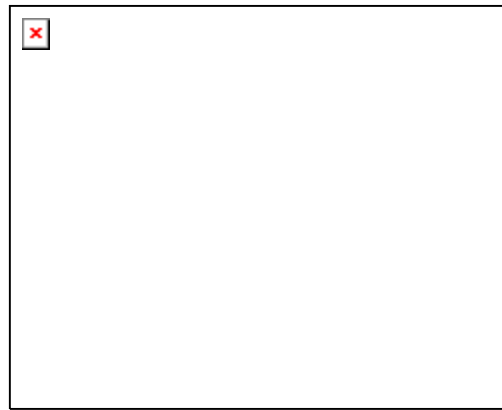


Рис. 3.7. К определению поперечной координаты частицы

В квантовой механике выявляется существенная особенность процесса измерения (взаимодействия прибора с изучаемым объектом): этот процесс всегда оказывает воздействие на подвергаемую измерению частицу. Такое воздействие принципиально не может быть сделано сколь угодно слабым. Так, например, если мы попытаемся определить координату частицы, освещая ее монохроматическим светом с длиной волны  $\lambda$ , то вследствие дифракционного характера рассеяния фотонов точность измерения координаты будет  $\Delta x \geq \lambda/\sin \varphi$ , где  $\varphi$  — угол рассеяния фотонов. Для повышения точности нужно уменьшать длину волны. Однако при рассеянии фотона на частице последняя испытывает отдачу, в результате чего ее импульс получает случайное приращение  $\Delta p_x \geq 2\pi\hbar \sin \varphi/\lambda$ . Таким образом, при одновременном измерении  $x$  и  $p_x$  снова приходим к соотношению (3.11).

Соотношение неопределенности справедливо не только для пары переменных координата – импульс, но и для некоторых других пар величин, называемых *сопряженными*. Н. Бор в 1928 г. выдвинул принцип *дополнительности*, в соответствии с которым описание состояния в квантовой механике распадается на два взаимоисключающих класса, совокупность которых могла бы дать в классическом понимании полное описание системы.

Строгое условие, описывающее возможность или невозможность одновременного сколь угодно точного измерения двух величин, будет указано в главе 4. Сейчас отметим только еще одну пару дополнительных величин: энергию и время. Действительно, для любого волнового процесса справедливо соотношение

$$\Delta t \Delta \omega \geq 2\pi. \quad (3.12)$$

Оно следует из теоремы Фурье и выражает, в частности, тот факт, что ограниченный во времени процесс не может быть строго монохроматическим. Домножая (3.12) на постоянную Планка, для дебройлевского волнового пакета получаем

$$\Delta t \Delta E \geq 2\pi\hbar. \quad (3.13)$$

Соотношение (3.13) применимо ко всем физическим объектам и означает, что чем короче время существования какого-то состояния или время, отведенное на его наблюдение, тем больше неопределенность энергии этого состояния. Строго определенной энергией может обладать только стационарное состояние, существующее бесконечно долгое время.

Сделаем оценки ограничений, накладываемых соотношением неопределенностей в различных ситуациях.

- Движение пылинки. Пусть положение пылинки массой 1 мг определено с точностью до размера атома, то есть  $\Delta x = 10^{-10}$  м. Тогда неопределенность скорости  $\Delta v = 2\pi\hbar/m\Delta x = 6,6 \cdot 10^{-18}$  м/с. Естественно, такая точность недоступна никакому измерению, поэтому в этом случае реальных ограничений не возникает.
- Движение электрона в электронно-лучевой трубке (кинескопе). Пусть отверстие электронного прожектора имеет диаметр  $d \sim 0,1$  мм, при этом квантовая неопределенность поперечной составляющей импульса  $\Delta p_x \geq \hbar/d = 7 \cdot 10^{-30}$  кг·м/с. Импульс электрона связан с ускоряющим напряжением  $U$  соотношением  $p = \sqrt{2meU}$ , при  $U = 10$  кВ получаем  $p \approx 5 \cdot 10^{-23}$  Н·с. Неопределенность в направлении движения электрона  $\Delta \phi = \Delta p_x/p = 1,4 \cdot 10^{-7}$  рад. Эта неопределенность при длине трубки  $l = 30$  см приведет к неопределенности точки попадания электрона на экран  $\Delta x_y = l\Delta \phi = 3 \cdot 10^{-8}$  м, что намного меньше размера одного пикселя (0,2 мм). Полученный результат указывает на то, что движение электрона в кинескопе практически неотличимо от движения по траектории.
- Электрон в атоме. Пусть электрон находится в атоме водорода на первой боровской орбите (см. формулу (1.9)). Чтобы к такому движению было применимо представление о движении по круговой траектории, необходимо, чтобы неопределенность значения радиуса  $\Delta r$  была мала по сравнению с самим радиусом орбиты. В этом случае неопределен-

ность значения радиального импульса будет  $\Delta p_r \approx 2\pi\hbar/\Delta r \gg 2\pi\hbar/r$ . Учтем, что по формуле (1.6) момент импульса  $L = rp = n\hbar$ , т.е. при  $n = 1$   $p = \hbar/r$ . Следовательно, неопределенность значения импульса электрона превосходит сам импульс, и в этом случае представление о движении по классической орбите теряет смысл. Заметим, однако, что по мере роста квантового числа  $n$  относительная неопределенность импульса уменьшается, и поведение электрона становится похожим на движение по траектории. Это проявление общего соотношения между квантовой и классической механикой: при очень больших  $n$  формулы квантовой механики переходят в формулы классической. Такой предельный переход, демонстрирующий преемственность физических законов, принято называть *принципом соответствия*.

# Глава 4. Квантовомеханические операторы. Уравнение Шредингера

## 4.1. Операторы физических величин и их свойства

В квантовой механике состояние физической системы обычно описывается волновой функцией  $\psi$ . Каждой физической величине сопоставляется *линейный оператор* — совокупность алгебраических, дифференциальных, интегральных и т. д. операций, производимых над волновой функцией. Хорошо известны, например, операторы Гамильтона  $\nabla = \mathbf{e}_x \frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{e}_y \frac{\partial}{\partial y} + \mathbf{e}_z \frac{\partial}{\partial z}$ , Лапласа  $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$  и другие. Оператор, сопоставляемый физической величине  $A$ , обозначается той же буквой со шляпкой наверху:  $\hat{A}$ . Линейность операторов означает, что для любых волновых функций  $\psi$  и  $\varphi$  и любых постоянных  $a$  и  $b$  выполняется равенство

$$\hat{A}(a\psi + b\varphi) = a\hat{A}\psi + b\hat{A}\varphi. \quad (4.1)$$

Операторы умножения, дифференцирования, интегрирования обладают этим свойством, в то время как возведение в степень, логарифмирование, тригонометрические преобразования не являются линейными операторами.

Конкретный вид оператора той или иной физической величины устанавливается, исходя из принципа соответствия. Так, оператор координаты  $x$  представляет собой умножение на координату:

$$\hat{x}\psi = x\psi. \quad (4.2)$$

Предположим, что измерение координаты  $x$  частицы производится многократно, причем система каждый раз имеет одинаковое начальное состояние, описываемые волновой функцией  $\psi(x)$ . Тогда вероятность обнаружения частицы в интервале  $(x, x + dx)$  равна  $dP(x) = \psi\psi^* dx$ , а среднее значение координаты, которое будет найдено в результате измерений, можно записать в виде

$$\langle x \rangle = \int x dP(x) = \int x\psi\psi^* dx = \int \psi^* \hat{x}\psi dx. \quad (4.3)$$

Этот результат является частным случаем одного из основных постулатов квантовой механики: *среднее значение величины  $A$ , наблюдаемое для квантового ансамбля с волновой функцией  $\psi$ , определяется как*

$$\langle A \rangle = \int \psi^* \hat{A}\psi dV, \quad (4.4)$$

где  $V$  — объем, по которому производится усреднение.



Предположим, что квантовая система находится в состоянии, описываемом такой волновой функцией  $\psi_n$ , что при измерении величины  $A$  всегда получается определенное значение  $A_n$ . Среднее значение отклонения результата измерения от  $A_n$  должно равняться нулю:

$$\langle (A - A_n)^2 \rangle = \int \psi_n^* (\hat{A} - A_n)^2 \psi_n dV = 0.$$

Такому условию удовлетворяют волновые функции, являющиеся решениями уравнения

$$\hat{A}\psi_n = A_n\psi_n, \quad (4.5)$$

то есть такие, для которых действие оператора  $\hat{A}$  сводится к умножению на число  $A_n$ .

Уравнение (4.5) называется *характеристическим уравнением*, функции  $\psi_n$  — *собственными функциями*, а числа  $A_n$  — *собственными значениями* оператора  $\hat{A}$ . Совокупность всех собственных значений называется *спектром* оператора. В зависимости от конкретного вида оператора его спектр может быть дискретным или непрерывным.

Один из постулатов квантовой механики гласит, что при измерении любой физической величины могут получаться только собственные значения соответствующего ей оператора. Так как измеряемая величина всегда вещественна, операторы физических величин должны иметь вещественный спектр. Такие операторы называются *самосопряженными*, или *эрмитовыми*.

Совокупность собственных функций  $\psi_n$  эрмитова оператора  $\hat{A}$  образует так называемый базис в пространстве волновых функций. Это означает, что произвольная волновая функция может быть представлена в виде линейной комбинации функций  $\psi_n$ :

$$\psi = \sum_n C_n \psi_n, \quad (4.6)$$

где  $C_n$  — комплексные коэффициенты. Квадрат модуля  $|C_n|^2$  коэффициента в разложении (4.6) равен вероятности получения значения  $A_n$  при измерении величины  $A$ . Например, если  $\psi_1$  и  $\psi_2$  — собственные функции оператора  $\hat{A}$ , то есть выполняются соотношения  $\hat{A}\psi_1 = A_1\psi_1$  и  $\hat{A}\psi_2 = A_2\psi_2$ , а квантовая система находится в состоянии, описываемом волновой функцией  $\psi = C_1\psi_1 + C_2\psi_2$ , то при измерениях величины  $A$  будет получаться значение  $A_1$  с вероятностью  $|C_1|^2$  и значение  $A_2$  с вероятностью  $|C_2|^2$  (функция  $\psi$  предполагается нормированной в соответствии с равенством (3.4)).

Предположим, что система находится в таком состоянии  $\psi$ , в котором определенные значения имеют одновременно две величины  $A$  и  $B$ . Это оз-

начает, что  $\psi$  является собственной функцией обоих операторов:

$$\hat{A}\psi_n = A_n\psi_n; \quad \hat{B}\psi_n = B_n\psi_n. \quad (4.7)$$

Умножим первое из равенств (4.7) слева на оператор  $\hat{B}$ . Получим

$$\hat{B}\hat{A}\psi_n = \hat{B}A_n\psi_n = A_n\hat{B}\psi_n = A_nB_n\psi_n.$$

Аналогично  $\hat{A}\hat{B}\psi_n = B_nA_n\psi_n$ . Отсюда следует, что

$$\hat{A}\hat{B}\psi_n = \hat{B}\hat{A}\psi_n. \quad (4.8)$$

Поскольку любая волновая функция может быть разложена по собственным функциям эрмитова оператора (см. формулу (4.6)), из (4.8) вытекает, что операторы  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  коммутируют, т. е. результат их действия не зависит от порядка применения. Из двух операторов  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  можно построить оператор

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}, \quad (4.9)$$

который называется *коммутатором*. Если выполняется соотношение (4.8), то, очевидно,  $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ .

Можно показать, что если коммутатор двух эрмитовых операторов равен нулю, то их собственные функции совпадают. Таким образом, справедлива следующая теорема: *две физические величины могут одновременно иметь определенные значения тогда и только тогда, когда соответствующие им операторы коммутируют.*

## 4.2. Операторы импульса, энергии и момента импульса

### Импульс

Определенным значением импульса обладает свободно движущаяся (например, вдоль оси  $x$ ) частица, волновой функцией которой является плоская волна

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \exp(i(\omega t - k_x x)) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}(Et - p_x x)\right).$$

Эта функция должна быть собственной для оператора проекции импульса, поскольку последняя сохраняет свое значение в процессе движения:

$$\hat{p}_x \psi = p_x \psi.$$

Покажем, что таким свойством обладает оператор

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}. \quad (4.10)$$

Действительно,

$$\hat{p}_x \psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \exp\left(\frac{i}{\hbar}(Et - p_x x)\right) = (-i\hbar) \frac{i}{\hbar} p_x \exp\left(\frac{i}{\hbar}(Et - p_x x)\right) = p_x \psi.$$

Аналогично выглядят и операторы других проекций импульса. Образовав из этих проекций вектор, получаем, что

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \left( \mathbf{e}_x \frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{e}_y \frac{\partial}{\partial y} + \mathbf{e}_z \frac{\partial}{\partial z} \right) = -i\hbar \nabla, \quad (4.11)$$

где  $\nabla$  — набла — оператор Гамильтона.

Оператор  $\hat{p}_x$  обладает *непрерывным спектром*, иными словами, на величину проекции импульса не накладывается каких-либо ограничений, она может быть любой.

Рассмотрим коммутационные соотношения (4.9) между операторами импульса и координаты.

$$\begin{aligned} \hat{x}\hat{p}_x \psi &= x(-i\hbar) \partial\psi/\partial x, \\ \hat{p}_x \hat{x} \psi &= (-i\hbar) \partial(x\psi)/\partial x = x(-i\hbar) \partial\psi/\partial x - i\hbar\psi. \end{aligned}$$

Ввиду произвольности функции  $\psi$ , получаем операторное равенство

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = \hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x \hat{x} = i\hbar. \quad (4.12)$$

(справа в этом уравнении стоит оператор умножения на константу  $i\hbar$ ). Аналогичные соотношения справедливы и для других проекций.

Поскольку коммутатор отличен от нуля, соотношение (4.12) означает, что *одноименные* проекции координаты и импульса не могут быть одновременно точно измерены — для них выполняется соотношение неопределенностей. Заметим, что коммутаторы типа  $[\hat{x}, \hat{y}]$ ,  $[\hat{p}_x, \hat{p}_y]$ ,  $[\hat{x}, \hat{p}_y]$  и т. д. равны нулю, то есть соответствующие пары величин могут одновременно иметь определенные значения.

## Энергия

Взяв классическое выражение для *кинетической энергии*  $T = mv^2/2 = p^2/2m$ , квантовомеханическую формулу получим, заменив значения величин соответствующими операторами. С учетом (4.10), (4.11)

$$\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta, \quad (4.13)$$

где  $\Delta$  — оператор Лапласа.

*Потенциальная энергия* зависит только от координат частиц, поэтому ее оператор — умножение на значение самой потенциальной энергии:

$$\hat{U}(x, y, z) = U(x, y, z) \quad (4.14)$$

В силу равенств (4.12) коммутатор  $[\hat{T}, \hat{U}] \neq 0$ , это означает, что в микромире невозможно одновременное точное измерение потенциальной и кинетической энергии. Физический смысл имеет *полная энергия*  $H = T + U$ , соответствующий оператор

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{U} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U \quad (4.15)$$

называется *оператором Гамильтона* или *гамильтонианом* системы (не путать с набла – оператором Гамильтона  $\nabla$ !).

В зависимости от конкретной ситуации гамильтониан системы может иметь непрерывный или дискретный спектр. Примеры расчетов будут рассмотрены в следующих разделах.

### Момент импульса. Пространственное квантование

В классической механике момент импульса (или угловой момент) частицы относительно начала координат определяется векторным произведением  $\mathbf{l} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ . В квантовой механике это соответствует оператору

$$\hat{\mathbf{l}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}. \quad (4.16)$$

Раскрывая векторное произведение и *соблюдая порядок сомножителей*, найдем операторы проекций момента импульса:

$$\begin{aligned} \hat{l}_x &= \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y = -i\hbar \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right), \\ \hat{l}_y &= \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z = -i\hbar \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right), \\ \hat{l}_z &= \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x = -i\hbar \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right). \end{aligned} \quad (4.17)$$

Рассмотрим коммутационные соотношения для двух проекций момента:

$$\begin{aligned} \hat{l}_x \hat{l}_y &= (\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y)(\hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z) = \hat{y}\hat{p}_z \hat{z}\hat{p}_x - \hat{y}\hat{p}_z \hat{x}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y \hat{z}\hat{p}_x + \hat{z}\hat{p}_y \hat{x}\hat{p}_z, \\ \hat{l}_y \hat{l}_x &= (\hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z)(\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y) = \hat{z}\hat{p}_x \hat{y}\hat{p}_z - \hat{x}\hat{p}_z \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_x \hat{z}\hat{p}_y + \hat{x}\hat{p}_z \hat{z}\hat{p}_y. \end{aligned}$$

Второе и третье слагаемые в обоих выражениях совпадают друг с другом, так как все входящие в них операторы попарно коммутируют. Поэтому для коммутатора  $[\hat{l}_x, \hat{l}_y]$ , с учетом того, что некоммутируют только одноименные координаты и проекции импульса, находим:

$$\begin{aligned}
[\hat{l}_x, \hat{l}_y] &= \hat{l}_x \hat{l}_y - \hat{l}_y \hat{l}_x = \hat{y} \hat{p}_z \hat{z} \hat{p}_x + \hat{z} \hat{p}_y \hat{x} \hat{p}_z - \hat{z} \hat{p}_x \hat{y} \hat{p}_z - \hat{x} \hat{p}_z \hat{z} \hat{p}_y = \\
&= -\hat{y} \hat{p}_x (\hat{z} \hat{p}_z - \hat{p}_z \hat{z}) + \hat{x} \hat{p}_y (\hat{z} \hat{p}_z - \hat{p}_z \hat{z}) = i\hbar (\hat{x} \hat{p}_y - \hat{y} \hat{p}_x) = i\hbar \hat{l}_z.
\end{aligned}$$

Аналогично получаются и два остальные правила коммутации:

$$\begin{aligned}
[\hat{l}_x, \hat{l}_y] &= i\hbar \hat{l}_z, \\
[\hat{l}_y, \hat{l}_z] &= i\hbar \hat{l}_x, \\
[\hat{l}_z, \hat{l}_x] &= i\hbar \hat{l}_y.
\end{aligned} \tag{4.18}$$

Таким образом, *любые две проекции оператора момента не коммутируют между собой*, поэтому не существует состояния, в котором эти проекции одновременно имели бы определенные значения (за исключением случая  $l_x = l_y = l_z = 0$ ). *Точно измерена может быть только одна проекция*. Обычно принимается, что эта выделенная проекция есть  $l_z$ .

Вторым оператором, наряду с проекцией  $\hat{l}_z$  характеризующей величину углового момента, является квадрат момента  $\hat{l}^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2$ . Нетрудно доказать, что коммутатор  $[\hat{l}^2, \hat{l}_z] = 0$ , следовательно, квадрат момента и одна из его проекций могут одновременно иметь определенные значения.

Для нахождения собственных функций и собственных значений указанных операторов следует перейти от декартовых координат  $(x, y, z)$  к сферическим координатам  $(r, \theta, \varphi)$ . При этом

$$\hat{l}^2 = -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right], \tag{4.19}$$

$$\hat{l}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}. \tag{4.20}$$

Характеристическое уравнение  $\hat{l}^2 \psi = L^2 \psi$  для оператора вида (4.19) хорошо известно в математической физике. Собственными функциями его являются так называемые *сферические функции*  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ , зависящие от двух целочисленных индексов<sup>1</sup>  $l$  и  $m$ , а собственные значения равны

$$L^2 = l(l+1)\hbar^2, \quad l = 0, 1, 2, \dots \tag{4.21}$$

Следовательно, модуль вектора момента принимает дискретный спектр значений

---

<sup>1</sup> Сферические функции с низкими значениями индексов имеют вид:  
 $Y_{00} = \frac{1}{4\pi}; \quad Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta; \quad Y_{1\pm 1} = \pm \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\varphi}.$

$$L = \hbar\sqrt{l(l+1)}. \quad (4.22)$$

Целое число  $l$  в квантовой механике называется *орбитальным квантовым числом*.

Найдем собственные функции и собственные числа оператора проекции момента  $\hat{l}_z$ . Из (4.20) получаем характеристическое уравнение

$$-i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} = l_z \psi.$$

Его решением является функция  $\psi = C \exp\left(i \frac{l_z}{\hbar} \varphi\right)$ . Поскольку изменение азимутального угла  $\varphi$  на  $2\pi$  возвращает точку в исходное положение, волновая функция должна быть периодичной с периодом  $2\pi$ :  $\psi(\varphi) = \psi(\varphi + 2\pi)$ . Это возможно только при выполнении условия

$$l_z = m\hbar, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (4.23)$$

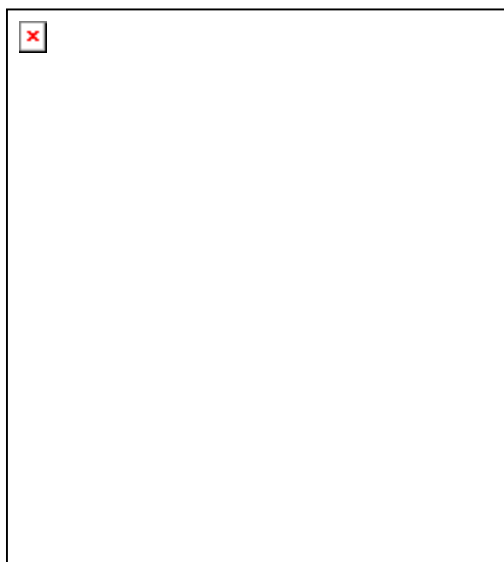
Равенство (4.23) означает, что проекция углового момента на любое направление квантуется. Как будет показано ниже, квантовое число  $m$  для заряженных частиц определяет также и величину магнитного момента частицы, поэтому оно называется *орбитальным магнитным квантовым числом*.

Из того, что проекция вектора не может быть больше его длины, следует, что должно выполняться неравенство

$$|m| \leq l. \quad (4.24)$$

Квантовые числа  $l$  и  $m$  совпадают с индексами сферических функций  $Y_{lm}$ .

Полученные соотношения могут быть проиллюстрированы *векторной моделью*, в которой *квантовый* угловой момент представляется вектором, как бы прецессирующим (вращающимся) вокруг оси  $z$  (рис. 4.1).



**Рис. 4.1.** Возможные ориентации вектора углового момента при  $l = 2$

Из соотношения (4.23) вытекает, что момент может быть ориентирован в пространстве только под определенными углами к оси  $z$ , так как его проекция на эту ось кратна постоянной Планка. При этом из-за прецессии проекции вектора  $\mathbf{l}$  на оси  $x$  и  $y$  остаются неопределенными. Из формул (4.22), (4.24) видно, что вектор момента никогда не может быть направлен точно вдоль оси  $z$ . Действительно, если бы такая ситуация реализовалась, проекции  $l_x$  и  $l_y$  одновременно точно равнялись бы нулю, что противоречило бы первому из равенств (4.18), а значит и соотношению неопределенности.

### 4.3. Уравнение Шредингера

Одной из основных задач квантовой механики является нахождение пространственно-временных волновых функций  $\psi(x, y, z, t)$  и связанных с ними результатов физических наблюдений в различных условиях. Для ее решения в нерелятивистском случае (без учета *спина*, см. Часть 2 данного пособия) служит уравнение, найденное Шредингером в 1926 г. и носящее его имя:

$$\hat{H}\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}, \quad (4.25)$$

где  $\hat{H}$  — гамильтониан системы (см. формулу (4.15)).

Вид этого уравнения был установлен, исходя из принципа соответствия между квантовой и классической механикой. Уравнение Шредингера (4.25) является одним из основных уравнений квантовой механики, справедливым для самого общего вида движения частицы в стационарных и в нестационарных полях. Все конкретные условия движения учитываются в гамильтониане  $\hat{H}$ .

Гамильтониан вообще занимает особое место среди квантовомехани-

ческих операторов. Можно доказать, что если оператор физической величины  $\hat{A}$  не зависит явно от времени, то справедливо операторное равенство

$$\frac{d}{dt}\hat{A} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{A}]. \quad (4.26)$$

Отсюда следует, что если оператор  $\hat{A}$  коммутирует с гамильтонианом, то среднее значение  $\langle A \rangle$  сохраняется.

Например, возьмем в качестве  $\hat{A}$  один из операторов проекций импульса  $\hat{p}_x$ ,  $\hat{p}_y$ ,  $\hat{p}_z$  и предположим, что внешние силы отсутствуют (в этом случае потенциальная энергия равна константе, которую можно положить равной нулю). Тогда оператор Гамильтона совпадает с оператором кинетической энергии (4.13) и, поскольку операторы проекций импульса коммутируют друг с другом, все коммутаторы типа  $[\hat{H}, \hat{p}_x]$  равны нулю. Следовательно, для свободного движения в квантовой механике импульс является сохраняющейся величиной.

Если под  $\hat{A}$  понимать сам оператор полной энергии  $\hat{H}$ , то он, очевидно, коммутирует сам с собой. Следовательно, если частица движется в стационарном поле и потенциальная энергия не зависит от времени, то полная энергия сохраняется. Отличие этих законов сохранения от классических заключается в том, что сохранение понимается в квантовомеханическом смысле, то есть для средних значений сохраняющихся величин.

Важную роль в квантовой механике играют *стационарные состояния* — такие состояния, в которых плотность вероятности  $|\psi|^2$  не зависит от времени. Для стационарности состояния необходимо, чтобы потенциальная функция  $U$  тоже была стационарной, то есть не зависела от времени. В этом случае общее решение уравнения Шредингера может быть представлено в виде произведения двух функций, одна из которых зависит от координат, а другая — от времени:

$$\Psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z)\varphi(t). \quad (4.27)$$

Поскольку  $\hat{H}\Psi = \varphi(t)\hat{H}\psi$ , то подстановка функции (4.27) в уравнение (4.25) и несложные преобразования дают:

$$\frac{\hat{H}\psi}{\psi} = i\hbar \frac{1}{\varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial t}. \quad (4.28)$$

Левая часть уравнения (4.28) не зависит от времени, правая — от координат, следовательно, и правая и левая части есть константа, которую обозначают  $E$ . Отсюда получаем *стационарное уравнение Шредингера* для пространственной части волновой функции



$$\hat{H}\psi = E\psi. \quad (4.29)$$

Это — характеристическое уравнение для гамильтониана. Следовательно, константа  $E$  является собственным значением оператора энергии, а  $\psi$ -функция стационарного состояния совпадает с собственной функцией оператора энергии.

## Глава 5. Простейшие задачи квантовой механики

### 5.1. Частица в бесконечно глубокой потенциальной яме

Предположим, что частица может двигаться только вдоль оси  $x$ , и ее движение ограничено непроницаемыми стенками  $x = -d/2$  и  $x = d/2$ . Такое движение можно представить как движение в потенциальном поле с энергией

$$\begin{cases} U = 0, & -d/2 \leq x \leq d/2; \\ U \rightarrow \infty, & x < -d/2, x > d/2. \end{cases} \quad (5.1)$$

Состояние частицы описывается волновой функцией, зависящей от одной координаты  $\psi(x)$ . Из (4.29), (4.15) следует, что стационарное уравнение Шредингера в области ямы ( $-d/2 \leq x \leq d/2$ ,  $U = 0$ ) будет иметь вид

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0. \quad (5.2)$$

Решение уравнения (5.2) хорошо известно:

$$\psi = C_1 \sin \alpha x + C_2 \cos \alpha x, \quad (5.3)$$

где  $C_1$  и  $C_2$  — произвольные постоянные, а  $\alpha = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$  — волновое число для пространственных осцилляций волновой функции.

Вне ямы волновая функция тождественно равна нулю, так как попасть в область с бесконечно большим потенциалом частица не может.

Волновая функция должна быть непрерывна на всей оси, поэтому она обязана обращаться в нуль на краях ямы. Это означает, что частота  $\alpha$  должна удовлетворять соотношению

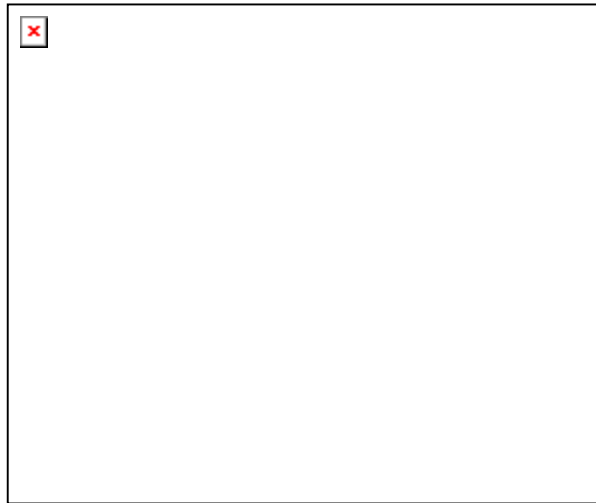
$$\alpha d = \pm n\pi, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (5.4)$$

причем при нечетных  $n$   $C_1 = 0$ , а при четных —  $C_2 = 0$ . Поскольку волновое число и длина волны связаны соотношением  $\alpha = 2\pi/\lambda$ , условие (5.4) означает, что на длине потенциальной ямы должно укладываться целое число полуволен (см. рис. 5.1).

Отсюда находим собственные значения энергии частицы

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2md^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (5.5)$$

Спектр энергии оказался дискретным, то есть энергия частицы квантуется. На рис. 5.1 на уровни  $E_n$  наложены графики волновых функций (а) и соответствующих им распределений вероятности обнаружения частицы в различных точках (б).



**Рис. 5.1.** Уровни энергии в прямоугольной потенциальной яме,  $a$  — волновые функции,  $b$  — плотность вероятности обнаружения частицы

Минимально возможная энергия равна  $E_1 = \pi^2 \hbar^2 / 2md^2$ , она тем больше, чем меньше ширина ямы  $d$ . Это соотношение является проявлением принципа неопределенности. Действительно, вся энергия частицы, находящейся внутри ямы — кинетическая, поэтому величина импульса  $p_1 = \sqrt{2mE} = \pi \hbar / d$ . Знак проекции импульса любой, и неопределенность импульса можно принять равной  $\Delta p_1 = 2p_1 = \hbar / d$ . Неопределенность положения частицы  $\Delta x = d$ , следовательно,  $\Delta p \cdot \Delta x = \hbar$ . Для остальных уровней энергии импульс и его неопределенность будут только больше.

Оценим расстояние между нижними энергетическими уровнями  $\Delta E = E_2 - E_1 = \frac{3\pi^2 \hbar^2}{2md^2}$  для различных физических ситуаций.

- Молекулы газа в сосуде:  $m \sim 10^{-26}$  кг,  $d \sim 10$  см;  $\Delta E \sim 10^{-37}$  Дж, или  $\Delta E \sim 10^{-18}$  эВ. Такое ничтожное расстояние между уровнями невозможно обнаружить никакими приборами, поэтому движение молекул будет неотличимо от классического.
- Свободный электрон в металле:  $m \sim 10^{-30}$  кг,  $d \sim 10$  см;  $\Delta E \sim 10^{-33}$  Дж  $\approx 10^{-14}$  эВ. Получен аналогичный результат: несмотря на то, что электрон является мельчайшей из микрочастиц, его движение в данной ситуации может описываться классическим образом.
- Электрон в атоме:  $m \sim 10^{-30}$  кг,  $d \sim 10^{-8}$  см;  $\Delta E \sim 10^{-17}$  Дж  $\approx 10^2$  эВ. В этом случае дискретность энергетических уровней весьма заметна, а, значит, классические методы здесь неприменимы.

## 5.2. Частица в потенциальной яме конечной глубины

Рассмотрим теперь решение уравнения



**Рис. 5.2.** Симметричная потенциальная яма

Шредингера для случая одномерной симметричной потенциальной ямы конечной глубины (см. рис. 5.2), потенциальная энергия которой задана соотношениями

$$U = 0 \text{ при } -d/2 \leq x \leq d/2,$$

$$U = U_0 \text{ при } x < -d/2 \text{ и } x > d/2.$$

Исследуем случай, когда полная энергия  $E$  удовлетворяет соотношению  $0 < E < U_0$ . Введем обозначения

$$\alpha = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}, \quad \beta = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad (5.6)$$

тогда уравнение Шредингера внутри ямы (рис. 5.2, область II) будет

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \beta^2\psi = 0, \quad (5.7)$$

а вне ямы (области I и III)

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - \alpha^2\psi = 0. \quad (5.8)$$

Решение уравнения (5.7) имеет вид

$$\psi_{II} = A \cos \beta x + B \sin \beta x, \quad (5.9)$$

а уравнения (5.8)

$$\psi_I = Ce^{\alpha x}, \quad \psi_{III} = De^{-\alpha x} \quad (5.10)$$



**Рис. 5.3.** Сшивка волновых функций

(знаки в показателях экспонент выбраны так, чтобы волновая функция обращалась в нуль при  $x \rightarrow \pm\infty$ ).

Решение (5.9) должно сшиваться с решениями (5.10), а именно: в точках  $x = \pm d/2$  должны быть непрерывны  $\psi$  и  $d\psi/dx$  (см. рис. 5.3). На границе  $x = -d/2$  это дает

$$A \cos \beta d/2 - B \sin \beta d/2 = Ce^{-\alpha d/2},$$

$$\beta A \sin \beta d/2 + \beta B \cos \beta d/2 = \alpha Ce^{-\alpha d/2},$$

а на границе  $x = d/2$

$$A \cos \beta d/2 + B \sin \beta d/2 = De^{-\alpha d/2},$$

$$-\beta A \sin \beta d/2 + \beta B \cos \beta d/2 = -\alpha De^{-\alpha d/2}.$$

Кроме того, из соображений симметрии плотность вероятности  $|\psi|^2$  должна быть четной функцией, следовательно,  $C^2 = D^2$ . Отсюда следует, что все решения подразделяются на два класса. У класса с четной волновой функ-

цией  $A \neq 0, B = 0, C = D$  и

$$\beta \cdot \operatorname{tg} \beta d = \alpha. \quad (5.11)$$

У класса с нечетной волновой функцией  $A = 0, B \neq 0, C = -D$  и

$$\beta \cdot \operatorname{ctg} \beta d = -\alpha. \quad (5.12)$$

Уровни энергии находятся из решений уравнений (5.11) и (5.12), которые можно получить графическим методом (см. рис. 5.4). Для этого введем безразмерные величины  $\xi = \beta d, \eta = \alpha d$ , тогда

$$\xi^2 + \eta^2 = 2mU_0d^2/\hbar^2. \quad (5.13)$$

Для решений с четной волновой функцией получаем из (5.11)

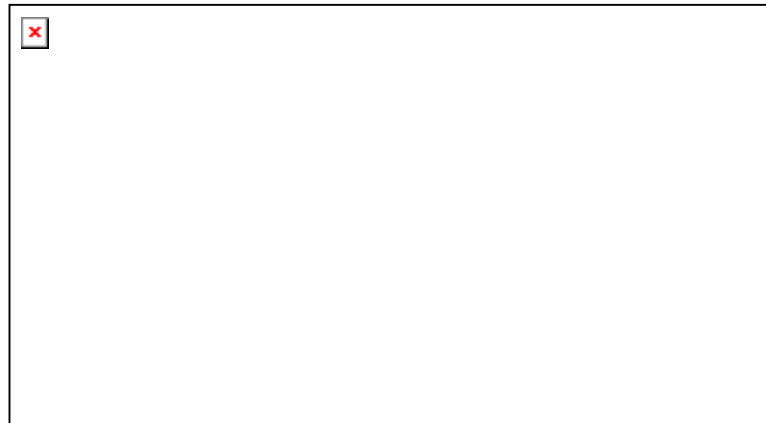
$$\eta = \xi \cdot \operatorname{tg} \xi, \quad (5.14)$$

а с нечетной — из (5.12)

$$\eta = -\xi \cdot \operatorname{ctg} \xi. \quad (5.15)$$

На рис. 5.4. показано нахождение параметров  $\xi$  и  $\eta$ , а, следовательно,  $\alpha$  и  $\beta$ , как координат точек пересечения графиков окружности (5.13) и функций (5.14) (рис. 5.4, *а*) или (5.15) (рис. 5.4, *б*). После этого по формулам (5.6) определяются значения энергии  $E$ .

Например, если радиус окружности, как на рис. 5.4, равен 7, то получаются пять уровней, причем уровням 1, 3, 5 соответствуют четные, а уровням 2, 4 — нечетные волновые функции. Нетрудно видеть, что при любых ширине и глубине ямы в ней имеется хотя бы один уровень с четной волновой функцией, а стало быть, частица всегда может быть локализована внутри ямы. Интересно, что для несимметричной ямы (уровень потенциала справа от ямы отличен от уровня потенциала слева) возможна ситуация, когда решения уравнения Шредингера внутри ямы отсутствуют. Это означает, что в такую яму (мелкую и узкую) частицу поместить нельзя.



**Рис. 5.4.** К определению уровней энергии в потенциальной яме для четных (*а*) и нечетных (*б*) волновых функций

Отличие от нуля волновой функции в областях I и III (см. рис. 5.3) означает, что существует некоторая вероятность обнаружения там частицы. Формально вычисленное значение кинетической энергии  $T = E - U$  в этих областях оказывается отрицательным. Этот результат, бессмысленный с точки зрения классической теории, оказывается возможным в микромире, поскольку, как указывалось в разделе 3.2, в квантовой механике невозможно одновременно точно измерить и потенциальную и кинетическую энергии. Действительно, в принципе можно сфокусировать микроскоп с большим разрешением (малой длиной волны света), чтобы убедиться, что электрон находится вне ямы. Однако при этом кванты света обладают энергией, достаточной для того, чтобы увеличить значение  $E$  до величины, большей  $U_0$ .

Рассмотрим теперь случай, когда полная энергия  $E > U_0$ . В этом случае величина  $\alpha$  чисто мнимая и вместо (5.10) получаем решения в виде гармонических функций (наподобие (5.9), но с другой частотой, см. рис. 5.5). Условия сшивки решений позволяют определить четыре постоянные, а оставшиеся две являются параметрами, которые могут принимать любые значения. Это означает, что при  $E > 0$  энергия не квантуется, а волновые функции не стремятся к нулю при  $x \rightarrow \pm\infty$ , то есть движение частицы *инфинитно*, как и в классической теории.

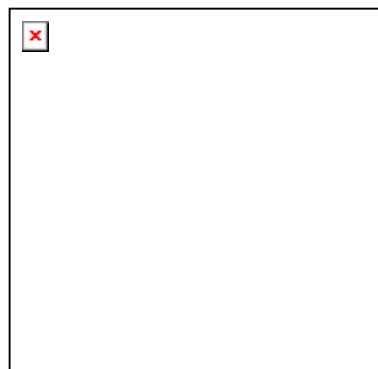


Рис. 5.5. Волновые функции при  $E > 0$

### 5.3. Потенциальный барьер. Туннельный эффект

Пусть частица, движущаяся слева направо, встречает на своем пути потенциальный барьер высоты  $U_0$  и ширины  $d$  (рис. 5.6, *a*). По классическим представлениям, если энергия частицы больше высоты барьера ( $E > U_0$ ), то она проходит над барьером, лишь уменьшая свою скорость. Если же  $E < U_0$ , как изображено на рисунке, то частица отражается от барьера и летит в обратную сторону.

В квантовой механике уравнение Шредингера в областях I — III будет иметь вид, схожий с уравнениями (5.7), (5.8):

$$\begin{aligned} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \alpha^2\psi &= 0 && \text{в областях I, III,} \\ \frac{d^2\psi}{dx^2} - \beta^2\psi &= 0 && \text{в области II,} \end{aligned} \tag{5.16}$$

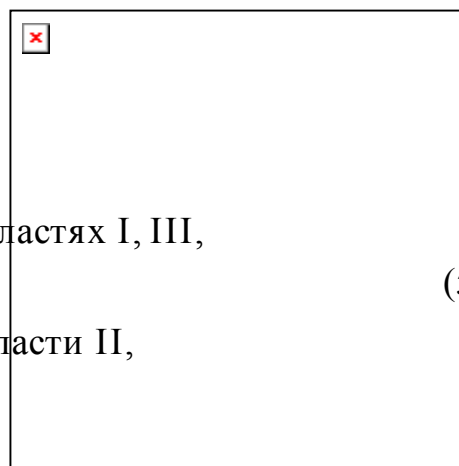


Рис. 5.6. Потенциальный барьер (*a*) и волновая функция (*b*)

где  $\alpha = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ ,  $\beta = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}$ .

Решения этих уравнений удобно записать в экспоненциальной форме:

$$\begin{aligned}\psi_1 &= A_1 e^{i\alpha x} + B_1 e^{-i\alpha x}, \\ \psi_2 &= A_2 e^{\beta x} + B_2 e^{-\beta x}, \\ \psi_3 &= A_3 e^{i\alpha x}.\end{aligned}\quad (5.17)$$

Решения с  $e^{i\alpha x}$  соответствуют волнам, распространяющимся в положительном направлении оси  $x$ , а с  $e^{-i\alpha x}$  — в противоположном направлении. В области I имеются волны, бегущая к барьеру (падающая) и от него (отраженная), а в области III — только от барьера (прошедшая).

Из условий непрерывности волновой функции и ее производной (см. рис. 5.6, б) при  $x = 0$  и  $x = d$ , выразим коэффициенты  $A_2, A_3, B_1, B_2$  через  $A_1$ . Отношение квадратов модулей амплитуд отраженной и падающей волны

$$R = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2} \quad (5.18)$$

представляет собой *коэффициент отражения* частиц от потенциального барьера, а отношение квадратов модулей прошедшей и падающей волн

$$D = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} \quad (5.19)$$

определяет *коэффициент пропускания* (или *прозрачности*).

Для этого коэффициента после несложных, но громоздких вычислений получаем

$$D \approx e^{-2\beta d} = e^{-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} d}. \quad (5.20)$$

Таким образом, существует отличная от нуля вероятность прохождения микрочастицы с энергией  $E < U_0$  через потенциальный барьер. Это явление называется *туннельным эффектом*. Как видно из формулы (5.20), вероятность прохождения резко уменьшается с ростом ширины и высоты барьера и массы частицы. Еще раз подчеркнем, что возможность обнаружить частицу в области барьера в силу принципа неопределенности не ведет к каким-либо противоречиям.

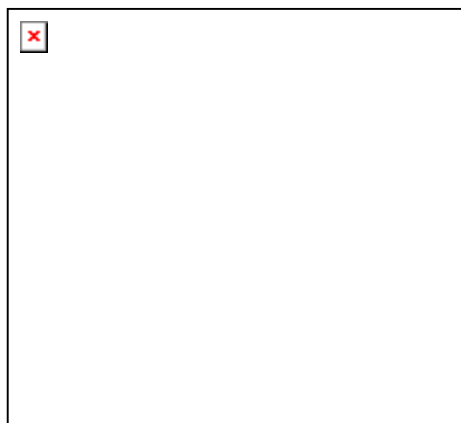
Туннельный эффект играет большую роль при движении электронов в твердых телах, определяет законы автоэлектронной (холодной) эмиссии и радиоактивного распада, используется для исследования структуры поверхности с высоким разрешением (туннельный микроскоп). Аналогом туннельного эффекта в оптике является нарушенное полное внутреннее

отражение, когда световая волна «проскакивает» через тонкий воздушный зазор между двумя призмами полного отражения.

Если энергия микрочастицы больше высоты барьера  $E > U_0$ , то с определенной вероятностью она может отразиться от скачка потенциала. Коэффициент отражения при этом равен

$$R = \left| \frac{\alpha - \beta}{\alpha + \beta} \right|^2. \quad (5.21)$$

Выражение (5.21) совпадает по форме с формулой Френеля для коэффициента отражения света при нормальном падении на границу раздела двух сред. Отметим, что вероятность отражения частицы не зависит от того, налетает она на потенциальный барьер ( $U_0 > 0$ ), или на потенциальную яму ( $U_0 < 0$ ). Полная вероятность отражения определяется суперпозицией волн, отраженных от переднего и заднего скачков потенциала барьера или ямы. Если при этом разность фаз отраженных волн равна  $\pi$ , то в результате интерференции они гасят друг друга и общий коэффициент отражения становится равным нулю (эффект, аналогичный интерференционному просветлению оптических поверхностей).



**Рис. 5.7.** Эффект Рамзауэра

В атомной физике интерференция волн, отраженных от двух границ потенциальной ямы, проявляется в *эффекте Рамзауэра*. Это эффект заключается в почти полной прозрачности тяжелых инертных газов аргона, криптона и ксенона для электронов с некоторым критическим значением кинетической энергии. На рис. 5.7 показаны зависимости эффективного сечения  $\sigma$  рассеяния пучка электронов от их скорости. Для большинства атомов  $\sigma$  монотонно возрастает с уменьшением скорости, как показано на рисунке для цинка. Это связано с тем, что медленные электроны дольше находятся вблизи атома, и поэтому сильнее отклоняются. Однако для криптона при некоторой скорости  $v_0$  сечение близко к нулю. Это объясняется тем, что при  $v = v_0$  длина волны электрона такова, что частичные отражения в начале и в конце соответствующей атому потенциальной ямы взаимно погашаются, и имеет место полное прохождение. В гелии и неоне эффект Рамзауэра отсутствует, так как у этих атомов произведение глубины ямы на ширину недостаточно для создания разности фаз  $\pi$  между отраженными волнами.

## 5.4. Гармонический осциллятор

Гармоническим осциллятором в квантовой механике, так же как и в



классической физике, называют частицу, потенциальная энергия которой имеет вид (см. рис. 5.8)

$$U = \frac{kx^2}{2}. \quad (5.22)$$

Этот закон имеет особое значение в физике, поскольку описывает *любые* типы колебаний малой амплитуды около положения устойчивого равновесия. Действительно, при произвольном виде потенциальной функции, ее можно разложить в ряд

$$U(x) = U(x_0) + U'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2}U''(x_0)(x - x_0)^2 + \dots$$

Так как в точке равновесия потенциальная энергия имеет минимум и  $U'(x_0) = 0$ , то при выборе  $x_0 = 0$  и  $U(x_0) = 0$  получаем выражение (5.22), где параметр  $k = U''(0)$ .

Классическое решение уравнения движения такого осциллятора с массой  $m$  хорошо известно, оно представляет собой гармоническое колебание с циклической частотой  $\omega = \sqrt{k/m}$ , амплитуда которого определяется полной энергией  $E$ . Направление движения классической частицы изменяется на обратное в *точках поворота*, координаты которых  $x_{\text{п}}$  определяются из условия  $E = U$ , или с учетом (5.22)

$$x_{\text{п}} = \pm\sqrt{2E/k}. \quad (5.23)$$

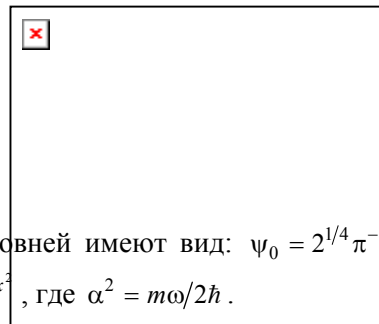
Рассмотрим теперь решение, которое дает квантовая механика. Уравнение Шредингера с потенциальной энергией (5.22) имеет вид

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{kx^2}{2}\right)\psi = 0. \quad (5.24)$$

Решения этого уравнения выражаются через обобщенные функции — *полиномы Чебышева – Эрмита*<sup>1</sup>, а разрешенные значения энергии равны

$$E_n = \hbar\omega(n + 1/2), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (5.25)$$

Уровни энергии гармонического осциллятора оказываются *эквидистантными*, то есть отстоящими друг от друга на одинаковое расстояние (рис. 5.8). Однако, в отличие от гипотезы Планка, наименьшее значение энергии осциллятора отлично от нуля и равно  $E_0 = \hbar\omega/2$ . Это значение называется *нулевой энергией*. Существование нулевой энер-



<sup>1</sup> Нормированные волновые функции для первых уровней имеют вид:  $\psi_0 = 2^{1/4} \pi^{-1/4} \alpha^{1/2} e^{-\alpha^2 x^2}$ ,  $\psi_1 = 2^{5/4} \pi^{-1/4} \alpha^{3/2} x e^{-\alpha^2 x^2}$ ,  $\psi_2 = 2^{-1/4} \pi^{-1/4} \alpha^{1/2} (4\alpha^2 x^2 - 1) e^{-\alpha^2 x^2}$ , где  $\alpha^2 = m\omega/2\hbar$ .

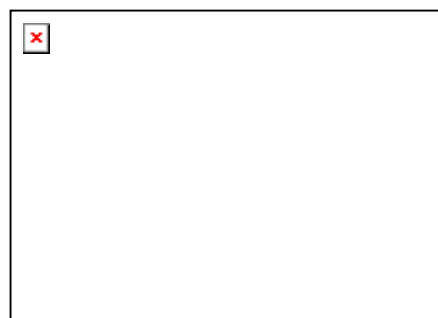
гии подтверждается экспериментами по рассеянию света кристаллами при низких температурах. Оказывается, что интенсивность рассеянного света по мере понижения температура стремится не к нулю, а к некоторому конечному значению, указывающему на то, что и при абсолютном нуле колебания атомов в кристаллической решетке не прекращаются. Если бы энергия осциллятора обратилась в нуль, то одновременно были бы точно известны импульс частицы ( $p = 0$ ) и ее координата ( $x = x_0$ ), что противоречило бы принципу неопределенности.

Решения уравнения Шредингера для гармонического осциллятора, конечно, отличаются в деталях от решений для прямоугольной ямы, но у них имеются и черты сходства:

- для связанных состояний имеется дискретный набор энергетических уровней;
- в основном состоянии частица обладает ненулевой кинетической энергией;
- волновая функция приобретает добавочную точку пересечения с осью  $x$  при увеличении квантового числа от  $n$  до  $n + 1$ ;
- вероятность обнаружения частицы максимальна между классическими точками поворота, однако имеются экспоненциально убывающие «хвосты» в классически запрещенной области  $|x| > x_1$ .

Описанные здесь черты имеют место для всех волновых функций связанных состояний при любой зависимости потенциальной энергии от координаты  $x$ .

Вероятность обнаружения квантового гармонического осциллятора, находящегося в основном состоянии, максимальна в центре потенциальной ямы (см. рис. 5.8), в то время как классическая частица большую часть времени находится вблизи точек поворота, где ее скорость минимальна. Однако с ростом квантового числа  $n$  это различие стирается. На рис. 5.9 показана функция  $|\psi|^2$  для  $n = 10$ . Средняя вероятность возрастает при приближении к классическим точкам поворота, а затем резко падает вне этих точек, как и ожидается в классической физике (пунктирная кривая). При дальнейшем увеличении  $n$  осцилляции становятся настолько частыми, что не могут быть обнаружены на эксперименте. Таким образом, предсказания квантовой теории для  $n \rightarrow \infty$



**Рис. 5.9.** Плотность вероятности положения для классического (пунктир) и квантового ( $n = 10$ , сплошная линия) осцилляторов

совпадают с классическим результатами, как того и требует принцип соответствия.

Рассмотрим теперь вопрос об *излучении и поглощении* света гармоническим осциллятором. Казалось бы, что в соответствии со вторым постулатом Бора в квантовом случае возможно излучение со всевозможными кратными частотами  $N\omega$ . Однако на самом деле это не так.

В классической физике электромагнитное излучение испускается, если изменяется дипольный момент системы  $d = qx$ , где  $q$  — величина одного из зарядов диполя,  $x$  — расстояние между положительным и отрицательным зарядами. По принципу соответствия в квантовой механике *вероятность* излучения (или поглощения) при переходе между состояниями с энергиями  $E_n$  и  $E_m$  и волновыми функциями  $\psi_n$  и  $\psi_m$  определяется параметром  $|d_{mn}|^2$ , где

$$d_{mn} = q \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n x \psi_m^* dx. \quad (5.26)$$

Величина  $d_{mn}$  называется *матричным элементом* дипольного момента. Если  $E_n > E_m$ , то переход  $n \rightarrow m$  соответствует излучению, а  $m \rightarrow n$  — поглощению. Из (5.26) следует, что  $d_{mn} = d_{nm}^*$  и  $|d_{mn}|^2 = |d_{nm}|^2$ , то есть вероятности переходов с излучением и с поглощением для данной пары уровней равны. Этот вывод носит общий характер и является проявлением принципа *детального равновесия*, в соответствии с которым вероятности прямого и обратного переходов всегда одинаковы.

Проанализируем матричные элементы переходов для гармонического осциллятора. Если  $n = 1$ ,  $m = 0$ , то, подставляя волновые функции, приведенные в примечании, получаем

$$d_{10} = C_{10} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-2\alpha^2 x^2} dx.$$

Этот интеграл не равен нулю, поскольку подынтегральное выражение всегда положительно. Аналогично при  $n = 2$ ,  $m = 1$

$$d_{12} = C_{12} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 (4\alpha^2 x^2 - 1) e^{-2\alpha^2 x^2} dx \neq 0.$$

Таким образом, переходы  $1 \leftrightarrow 0$  и  $2 \leftrightarrow 1$  являются *разрешенными*.

Рассмотрим теперь переход между состояниями  $n = 2$ ,  $m = 0$ .

$$d_{02} = C_{02} \int_{-\infty}^{\infty} x (4\alpha^2 x^2 - 1) e^{-2\alpha^2 x^2} dx.$$

Теперь под интегралом стоит нечетная функция, следовательно, он равен нулю и соответствующий переход *запрещен*.

На основании свойств полиномов Чебышева – Эрмита можно показать, что *правила отбора* для гармонического осциллятора разрешают излучательные переходы только при выполнении условия

$$n - m = \pm 1 \quad \text{или} \quad \Delta n = \pm 1. \quad (5.27)$$

Следовательно, квантовый осциллятор, так же как и классический, излучает свет только с одной частотой  $\omega$ .

## 5.5. Связанные потенциальные ямы. Вырождение уровней

Рассмотрим ситуацию, когда имеются две одинаковые потенциальные ямы, разделенные некоторым расстоянием  $r$ . Если это расстояние велико (рис. 5.9, *a*), то основное состояние частицы описывается волновой функцией, которая совпадает с волновыми функциями  $\psi_1$  (частица находится в левой яме) или  $\psi_2$  (частица в правой яме). При этом энергии соответствующих состояний одинаковы, положение энергетических уровней показаны на рис. 5.10, *a* штриховыми линиями.



**Рис. 5.10.** Энергетические уровни и волновые функции частицы в двух близких потенциальных ямах

Состояния с одинаковыми энергиями называются *вырожденными*, а число различных состояний с каким-либо значением энергии называется *кратностью вырождения* соответствующего энергетического уровня. В приведенном примере кратность вырождения равна двум.

Если уменьшить расстояние  $r$  между ямами, то частица вследствие туннельного эффекта может перейти из одной ямы в другую (рис. 5.10, *б*). В этих условиях волновые функции  $\psi_1$  и  $\psi_2$  перестают быть собственными функциями оператора Гамильтона, описывающими стационарными со-

стояниями. Новые собственные функции являются их линейными комбинациями: антисимметричной

$$\Psi_{as} = \Psi_1 - \Psi_2,$$

показана на рисунке сплошной линией, и симметричной

$$\Psi_s = \Psi_1 + \Psi_2,$$

показана пунктирной линией.

Первоначальный энергетический уровень расщепляется на два, причем уровень 1, соответствующий антисимметричному состоянию, лежит выше уровня 2 симметричного состояния. Таким образом, при возникновении «взаимодействия» между потенциальными ямами, происходит *снятие вырождения*.

При дальнейшем уменьшении расстояния  $r$ , взаимодействие усиливается, вероятность туннельного перехода растет и увеличивается расщепление энергетических уровней (рис. 5.10, *в*).

Явление снятия вырождения (полного или частичного) при появлении какого-либо дополнительного взаимодействия имеет общий характер. В частности, оно проявляется в расщеплении энергетических уровней атомов в магнитном или электрическом полях, в образовании зонной структуры энергетического спектра электронов в твердом теле и других физических эффектах.

---

## Литература

1. Савельев И.В. Курс общей физики. Кн.5. Квантовая оптика. Атомная физика. Физика твердого тела. Физика атомного ядра и элементарных частиц. – М: АСТ, 2002. – 368 с.
2. Детлаф А.А., Яворский Б.М. Курс физики. – М.: Высшая школа, 1999. – 718 с.
3. Фриш С.Э. Тиморева А. В. Курс общей физики. Т. 3 . Оптика. Атомная физика. – М.: Лань, 2006. – 656 с.
4. Иродов И. Е. Квантовая физика . Основные законы. – М.: Бинум. Лаборатория базовых знаний, 2007. – 256 с.
5. Сивухин Д.В. Общий курс физики. Т. 5. Атомная и ядерная физика. – М.: Наука, 1986. – 688 с., 1989 – 416 с.
6. Спроул Р. Современная физика. – М.: Наука, 1974. – 592 с.
7. Трофимова Т. И. Курс физики: Учеб. пособие для вузов. – М.: Высшая школа, 2003. – 541 с.
8. Физика микромира. Маленькая энциклопедия. (Гл. редактор Д.В. Ширков) – М.: Сов. Энциклопедия., 1980. – 528 с.
9. Яворский Б.М. Детлаф А.А. Лебедев А.К. Справочник по физике для инженеров и студентов вузов. – М.: Оникс. 21 век. – 1056с.
10. Физическая энциклопедия в 5-ти томах. – М.: Бол. Российская энциклопедия.



В 2007 году СПбГУ ИТМО стал победителем конкурса инновационных образовательных программ вузов России на 2007–2008 годы. Реализация инновационной образовательной программы «Инновационная система подготовки специалистов нового поколения в области информационных и оптических технологий» позволит выйти на качественно новый уровень подготовки выпускников и удовлетворить возрастающий спрос на специалистов в информационной, оптической и других высокотехнологичных отраслях экономики.

## Кафедра физики

Кафедра физики как одна из общеобразовательных кафедр существует с момента организации Ленинградского института точной механики и оптики. В довоенные и послевоенные годы кафедрой возглавляли А.П. Ющенко, затем профессора В.Ф. Трояновский, Л.С. Поллак, И.В. Поройков, К.К. Аглинцев, Д.Б. Гогоберидзе, Н.А. Толстой, С.В. Андреев, А.Я. Вятский, основоположник теплофизической школы ЛИТМО профессор Г.М. Кондратьев и его ученики доцент А.Ф. Бегункова и профессор Н.А. Ярышев. В настоящее время коллектив кафедры составляют выпускники нашего университета, Ленинградского Политехнического института, физического факультета Ленинградского государственного университета. На кафедре успешно работают 7 профессоров, докторов наук; 20 доцентов, кандидатов наук; 2 старших преподавателя, кандидата наук; 1 старший преподаватель и 4 ассистента.

С момента образования кафедры ее сотрудники уделяют большое внимание совершенствованию методики преподавания физики, как одной из базовых дисциплин подготовки будущих инженеров и формирующему интеллект предмету. Сотрудниками кафедры написано более тридцати учебных пособий для студентов по различным разделам инженерного курса физики, по проведению лабораторных работ, обработке результатов физического эксперимента и решению физических задач. В настоящее время проводится комплексная работа по совершенствованию всего учебного процесса, включая создание фронтальных компьютеризированных учебных лабораторий, банков контроля и проверки усвоения знаний, подготовку программно-методического обеспечения по дистанционному обучению студентов через компьютерные сети RUNNET и INTERNET.

Коллектив кафедры ведет активную научную работу. С 1973 года получили развитие научные исследования в области теплофизики, в частности, нестационарной теплопроводности и теплотрии. С 1979 года стали систематически проводиться научные разработки в области спектроскопии разупорядоченных конденсированных систем, с 1987 года по физике волновых процессов, нелинейной оптике и радиофизике анизотропных сред, с 1994 года – по оптическому и рентгеновскому рассеянию надмолекулярными, в частности, фрактальными структурами, с 1999 года – по фотонным кристаллам. Научные разработки кафедры неоднократно удостоивались грантов Министерства образования, Российских и Международных научных фондов.

С 1993 года кафедра получила статус выпускающей по специальности 03.05.33 «Профессиональное обучение. Компьютерные технологии», а с 2003 года – по специальности 07.19.00 «Информационные системы и технологии». Десятки студентов и аспирантов, руководимые преподавателями кафедры, удостоивались стипендий Президента России, Правительства России, Администрации Санкт-Петербурга, Международных организаций (ISSEP, SPIE и др.).