

**РОСЖЕЛДОР**

**Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Ростовский государственный университет путей сообщения»**

**(ФГБОУ ВО РГУПС)**

---

**АТОМНАЯ ФИЗИКА**

Учебно-методическое пособие

Часть 2

Ростов-на-Дону  
2017

УДК 539.18(07) + 06

Рецензент – доктор физико-математических наук, профессор И.Д. Петров

Атомная физика: учебно-методическое пособие. В 3 ч. Ч. 2 / В.Ф. Демёхин, Б.М. Лагутин, Н.В. Демёхина, В.А. Явна; ФГБОУ ВО РГУПС. – Ростов н/Д, 2017. – 32 с.

Изложены основы теории квантовой механики, используемой при описании микросистем.

Предназначено для студентов 2-го курса технических специальностей в дополнение к лекционному курсу.

Одобрено к изданию кафедрой «Физика».

## ОГЛАВЛЕНИЕ

|  |    |
|--|----|
| 1 Уравнения движения .....                               | 4  |
| 2 Динамика неопределенных состояний.....                 | 4  |
| 2.1 Базисные состояния .....                             | 7  |
| 3 Динамика недетерминированных состояний .....           | 8  |
| 3.1 Стационарные состояния .....                         | 11 |
| 4 Уравнение Шредингера .....                             | 12 |
| 5 Анализ уравнения Шредингера .....                      | 15 |
| 5.1 Свободная частица .....                              | 15 |
| 5.2 Частица с потенциальной энергией .....               | 18 |
| 5.3 Энергия частицы .....                                | 18 |
| 5.4 Графическое решение уравнения Шредингера .....       | 19 |
| 5.5 Несвязанные состояния .....                          | 20 |
| 5.6 Частица в потенциальной яме .....                    | 22 |
| 5.7 Связанные состояния .....                            | 23 |
| 5.8 Основное состояние частицы в потенциальной яме ..... | 24 |
| 5.9 Туннельный эффект .....                              | 25 |
| 6 Принцип неопределенности Гейзенберга .....             | 25 |
| 7 Общие методические указания .....                      | 30 |
| 7.1 Контрольные вопросы .....                            | 30 |
| 7.2 Рекомендуемая литература.....                        | 31 |

# 1 УРАВНЕНИЯ ДВИЖЕНИЯ

Описание динамики классических частиц основано на втором законе Ньютона. При заданной массе частицы, известных действующих на нее силах  $\vec{F} = M \vec{a}$ , можно, пользуясь уравнением  $\vec{F} = M \vec{a}$ , определить скорость частицы в любой момент времени и найти ее траекторию, если известна начальная скорость частицы. Классическая динамика успешно применяется при описании как движения планет, так и движения микрочастиц с высокой энергией, например, в ускорителях.

Поскольку в микромире нельзя приготовить состояние с известными положением и импульсом частицы, то нельзя задать начальные условия в классическом смысле. Поэтому состояние частицы характеризуется амплитудой вероятности  $\Psi(x, T)$ . Изменение этой функции со временем определяется некоторыми уравнениями, которые играют роль второго закона Ньютона в случае микрочастиц. Нашей целью является знакомство с этими уравнениями и методами описания динамики состояний микрочастиц.

## 2 ДИНАМИКА НЕОПРЕДЕЛЕННЫХ СОСТОЯНИЙ

Для выделения того существенного, что отличает уравнения движения микромира от классических методов вероятностного описания динамики системы, предварительно рассмотрим две задачи классической физики.

Пусть частица может перемещаться между тремя ячейками (рис. 1). Три базисных состояния для положения частицы соответствуют случаям, когда частица находится в одной из ячеек. Наблюдатель, для которого состояние  $|C\rangle$  частицы является неопределенным, характеризует его, указывая вероятности нахождения частицы в каждой из ячеек.

$$|C\rangle = P_1 |1\rangle + P_2 |2\rangle + P_3 |3\rangle.$$

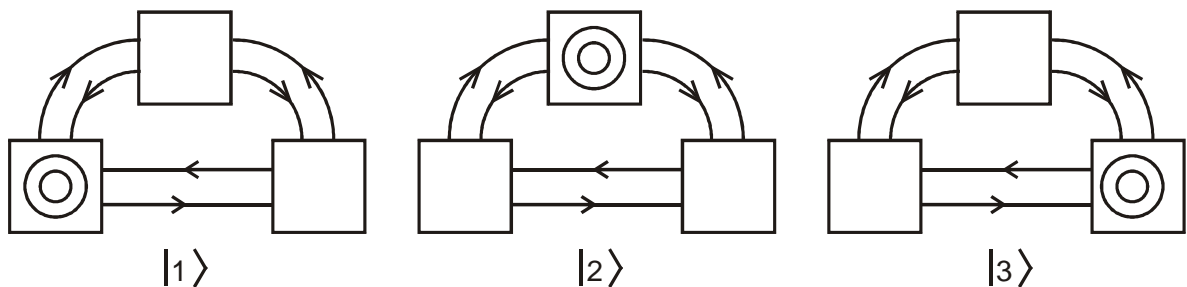


Рис. 1

При этом он утверждает, что при наблюдении целая частица всегда находится **или** в ячейке 1, **или** в ячейке 2, **или** в ячейке 3, и при большом числе наблюдений относительные числа обнаружения частицы в каждой из ячеек будут равны соответственно. Всегда будет выполняться равенство  $P_1 + P_2 + P_3 = 1$ .

Сделаем два предположения. Первое: существует определенная вероятность  $H_{j,k}$  перехода частицы в единицу времени из ячейки  $k$  в ячейку  $j$ . Второе, вероятность перехода частицы из ячейки  $k$  в ячейку  $j$  пропорциональна вероятности нахождения частицы в ячейке  $k$  в данный момент времени.

В таком случае вероятность нахождения частицы в ячейке 1 в момент времени  $t + \Delta t$  будет равна вероятности ее нахождения в этой же ячейке в момент времени  $t$ , плюс вероятность того, что частица перейдет в ячейку 1 или из ячейки 2, или из ячейки 3 за время  $\Delta t$ , и минус вероятность ухода частицы за время  $\Delta t$  из ячейки 1 в ячейку 2 и 3. Итак,

$$P_1(t + \Delta t) = P_1(t) + H_{1,2}P_2(t)\Delta t + H_{1,3}P_3(t)\Delta t - H_{2,1}P_1(t)\Delta t - H_{3,1}P_1(t)\Delta t.$$

Преобразуем это уравнение:

$$\frac{P_1(t + \Delta t) - P_1(t)}{\Delta t} = (-H_{1,2} - H_{3,1})P_1(t) + H_{1,2}P_2(t) + H_{1,3}P_3(t). \quad (1)$$

Обозначим  $-H_{2,1} - H_{3,1} = H_{1,1}$ . Это вероятность ухода частицы в единицу времени из первой ячейки (если она там достоверно находится) во все остальные. Левая часть уравнения (1) при  $\Delta t \rightarrow 0$  превращается в производную, следовательно,

$$\frac{dP_1(t)}{dt} = \sum_{k=1}^3 H_{1,k} P_k(t). \quad (2)$$

Два других уравнения для  $P_2$  и  $P_3$  имеют аналогичный вид. Итак, система трех уравнений

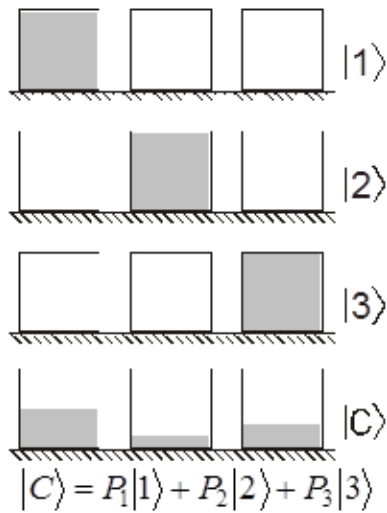
$$\frac{dP_j(t)}{dt} = \sum_{k=1}^3 H_{j,k} P_k(t) \quad (3)$$

позволит рассчитать значение  $P_j(t)$ , если они известны для какого-то момента времени. Для этого необходимо знать девять чисел  $H_{j,k}$ , которые удобно записать в виде таблицы, называемой матрицей:

$$\begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & H_{13} \\ H_{21} & H_{22} & H_{23} \\ H_{31} & H_{32} & H_{33} \end{pmatrix}. \quad (4)$$

Эта матрица вместе с уравнениями (3) определяет всю динамику рассмотренной системы. Аналогичный метод описания может быть применен при любом количестве ячеек.

Рассмотрим еще одну классическую систему, описание которой по форме ближе всего к описанию поведения частиц в микромире. Этот пример, так же как и предыдущий, может служить для желающих основой образа для качественного восприятия некоторых свойств состояния микрочастицы.



$$P_1 + P_2 + P_3 = 1$$

Рис. 2

Пусть имеется три одинаковых сосуда. Весь объем имеющейся в них воды равен объему одного из сосудов. Примем величину этого объема за единицу. В качестве базисных состояний, характеризующих распределение воды в этих сосудах, выберем три состояния (рис. 2), в каждом из которых вся вода находится в одном из сосудов, а два других пусты. Тогда любое распределение воды может быть охарактеризовано тремя числами  $P_1$ ,  $P_2$  и  $P_3$ , показывающими объем воды, находящейся в каждом из сосудов. При этом  $P_1 + P_2 + P_3 = 1$ . В данном примере система находится сразу во всех базисных состояниях, т. е.  $\mathbf{u}$  в первом,  $\mathbf{u}$  во втором,  $\mathbf{u}$  в третьем. Структура последнего предложения совпадает

со структурой утверждений в квантовой механике, где при описании недетерминированных состояний используется форма «находится  $\mathbf{u}$  в ...,  $\mathbf{u}$  в ...,  $\mathbf{u}$  в ...».

Представим, что некоторые устройства перекачивают из одного сосуда в другой в единицу времени определенную долю имеющейся в сосуде воды. Тогда количество воды, перекачанное из сосуда  $k$  в сосуд  $j$  за время  $\Delta t$ , равно

$$N_{j,k} P_k \Delta t.$$

Здесь  $N_{j,k}$  показывает долю воды, перекачиваемой из *полного* сосуда  $k$  в сосуд  $j$  за единицу времени.

Если известно, сколько воды находится в момент времени  $t$  в каждом из сосудов, т. е.  $P_k(t)$ , и работают одновременно все перекачивающие устройства, то знание всех  $N_{j,k}$  позволит рассчитать объем воды в каждом из сосудов в любой момент времени.

Например, объем воды в первом сосуде в момент времени  $t + \Delta t$  станет равным

$$P_1(t + \Delta t) = P_1(t) + N_{1,2} P_2(t) \Delta t + N_{1,3} P_3(t) \Delta t - N_{2,1} P_1(t) \Delta t - N_{3,1} P_1(t) \Delta t.$$

Обозначим  $-N_{2,1} - N_{3,1} = N_{1,1}$ , где  $N_{1,1}$  характеризует долю воды, уходящей из первого полного сосуда в единицу времени во все остальные. При  $\Delta t \rightarrow 0$  получаем

$$\frac{dP_1(t)}{dt} = \sum_{k=1}^3 N_{1,k} P_k(t). \quad (5)$$

Аналогичный вид имеют уравнения и для  $P_2(t)$  и  $P_3(t)$ .

Несмотря на то что рассмотренные системы существенно отличаются друг от друга, их динамика описывается одинаковыми уравнениями: (3) и (5).

Эти два примера могут служить образами для качественного восприятия некоторых свойств микрочастиц, так как описание динамики недетерминированных состояний во многом похоже на динамику рассмотренных неопределенных состояний.

Как известно, адекватного образа недетерминированного состояния частицы не может существовать, *поскольку недетерминированное состояние ненаблюдаемо*. Тем не менее в физике моделируются некоторые свойства частиц в недетерминированных состояниях. В частности, Бор предлагал образ неделимой, цельной частицы, причем теория предсказывает только вероятности обнаружения частицы в каждом базисном состоянии при наблюдениях за ней. Шредингер предлагал образ делокализованной частицы, плотность которой равна вероятности ее обнаружения в данном месте. Рассмотренные примеры как раз и соответствуют этим двум моделям.

Модель жидкости, перетекающей между сосудами, будет почти полностью передавать свойства квантовых состояний, если ее дополнять способностью всей жидкости локализоваться в один сосуд при измерении. Причем вероятность такой локализации должна быть пропорциональна количеству имеющейся в данном сосуде жидкости. Модель с частицей надо дополнить некоторой способностью частицы делокализоваться, чтобы при характеристике ее положения можно было говорить, что частица находится *и* в ..., *и* в ..., *и* в .... Классическая физика не знает объектов, обладающих такими дополнительными свойствами.

## 2.1 Базисные состояния

При описании квантово-механических систем, так же как и в классической физике, используются базисные состояния  $|k\rangle$ . Эти состояния характеризуются амплитудами вероятности, которые позволяют описать все свойства частицы в базисных состояниях. Если система имеет возможность находиться во всех базисных состояниях, то, согласно третьему принципу квантовой механики, амплитуда вероятности, характеризующая любое состояние системы, является линейной комбинацией амплитуд вероятностей, описывающих базисные состояния:

$$|\Psi\rangle = \sum_k c_k |\varphi_k\rangle = \sum_k c_k |k\rangle.$$

Здесь мы используем предложенные Дираком скобочные обозначения. Произвольное нормированное состояние  $k$  обозначается символом  $|k\rangle$ . Это обозначение эквивалентно амплитуде вероятности  $\varphi_k$ , характеризующей данное состояние. Комплексно сопряженная амплитуда вероятности  $\varphi_j^*$  обозначается символом  $\langle j|$ . Скалярное произведение  $\varphi_k$  и  $\varphi_j^*$  обозначается следующим образом:

$$\langle \varphi_j^* | \varphi_k \rangle = \langle j | k \rangle.$$

Амплитуда, стоящая справа, характеризует начальное состояние, а слева – конечное. При этой амплитуда, стоящая слева, комплексно сопряжена с амплитудой вероятности, характеризующей конечное состояние.

Набор базисных состояний должен быть полным, т. е. должна быть возможность охарактеризовать с помощью этого набора любое состояние системы. Кроме этого обычно стремятся выбрать все базисные состояния ортогональными и нормированными на единицу.

Ортонормированность набора базисных состояний  $|1\rangle, |2\rangle, \dots |j\rangle, \dots |i\rangle, \dots |N\rangle$  в этих обозначениях записывается как  $\langle i|j\rangle = \delta_{ij}$ , где  $\delta_{ij} = 1$  при  $i = j$  и  $\delta_{ij} = 0$  при  $i \neq j$ .

Применяемый здесь способ описания позволяет развить некоторую аналогию с вектором в обычном пространстве для задач с двумя и тремя базисными состояниями, а для более широкого базиса – с  $N$ -мерным векторным пространством. Вектор в обычном трехмерном пространстве выражается через ортогональные и нормированные орты  $\vec{i}$ ,  $\vec{j}$  и  $\vec{k}$  следующим образом:  $\vec{R} = R_x \vec{i} + R_y \vec{j} + R_z \vec{k}$ , где скалярное произведение  $(\vec{i} | \vec{j}) = \delta_{ij}$ .

Однако если  $R_x \vec{i}$  – новый вектор длиной  $R_x$ , то  $c_k |k\rangle$  – то же самое базисное состояние  $|k\rangle$ , только встречающееся с вероятностью  $|c_k|^2$ .

### 3 ДИНАМИКА НЕДЕТЕРМИНИРОВАННЫХ СОСТОЯНИЙ

Итак, недетерминированное состояние микросистемы описывается амплитудой вероятности, являющейся линейной комбинацией базисных состояний:

$$|\Psi\rangle = \sum_k c_k |k\rangle. \quad (6)$$

Здесь  $c_k$  – амплитуда участия базисного состояния  $|k\rangle$  в истинном состоянии системы. Квадрат модуля этой амплитуды дает вероятность обнаружения системы в базисном состоянии  $|k\rangle$ . Сами базисные состояния также описаны на языке амплитуд вероятности, что особенно важно в тех случаях, когда требуется детальное описание этих состояний.

Коэффициенты  $c_k$  могут зависеть от времени, и необходимо иметь уравнения, которые по известным в какой-то момент времени всем  $c_k$  позволят определить их значения в любой будущей и прошлый моменты времени. Такие уравнения называются уравнениями движения.

Пусть в момент времени  $t$  система достоверно находится в базисном состоянии  $|k\rangle$ . Подождем время  $\Delta t$ , за которое система может перейти в любое другое состояние  $|j\rangle$  или остаться в прежнем состоянии.

Обозначим амплитуду вероятности того, что через время  $\Delta t$  система окажется в состоянии  $|j\rangle$ , следующим образом:



$$\langle j|U(\Delta t)|k\rangle. \quad (7)$$

Здесь  $U(\Delta t)$  – оператор ожидания или оператор эволюции, характеризующий поведение системы, предоставленной самой себе.

Очевидно, что для полной характеристики динамики системы, описываемой  $N$  базисными состояниями, необходимо знать  $N^2$  величин типа (7), дающих амплитуды вероятностей переходов между всеми базисными состояниями за время  $\Delta t$ . Обычно эти величины записываются в виде таблицы (матрицы) типа (4), которая называется *матрицей оператора эволюции*, а выражения (7) называются матричными элементами оператора эволюции.

Часто вместо оператора эволюции рассматривают другой оператор ( $T$ ), матричные элементы которого следующим образом связаны с (7):

$$\langle j|U(\Delta t)|k\rangle = \delta_{jk} + T_{j,k} \Delta t, \quad (8)$$

где  $\delta_{jk} = 1$  при  $j = k$  и  $\delta_{jk} = 0$  при  $j \neq k$ .

Проанализируем (8). Если  $j \neq k$ , то

$$\langle j|U(\Delta t)|k\rangle = T_{j,k} \Delta t. \quad (9)$$

Поэтому можно говорить, что  $T_{j,k}$  является амплитудой вероятности перехода из состояния  $|k\rangle$  в состояние  $|j\rangle$  за единицу времени.

Если  $j = k$ , то

$$\langle k|U(\Delta t)|k\rangle = 1 + T_{k,k} \Delta t. \quad (10)$$

Это выражение показывает, что амплитуда вероятности обнаружить систему в прежнем состоянии при  $\Delta t = 0$  равна единице. Величину  $T_{k,k}$  можно интерпретировать, как амплитуду вероятности выхода системы из состояния  $k$  во все другие базисные состояния в единицу времени. Однако для  $T_{k,k}$ , как будет видно из дальнейшего, имеется и другая интерпретация.

Вместо матричных элементов  $T_{j,k}$  обычно используются матричные элементы  $H_{j,k}$ , определяемые соотношением

$$T_{j,k} = -\frac{i}{\hbar} H_{j,k}, \quad (11)$$

где  $i = \sqrt{-1}$ ,  $\hbar$  – постоянная Планка. На этом основании (8) принимает вид:

$$\langle j|U(\Delta t)|k\rangle = \delta_{jk} - \frac{i}{\hbar} H_{j,k} \Delta t. \quad (12)$$

Такая замена делается для того, чтобы величины  $H_{k,k}$  были действительными. То, что  $T_{k,k}$  содержит мнимую единицу только в качестве множителя, вытекает из следующих рассуждений.

Если вероятности переходов системы из состояния  $k$  во все другие состояния ( $j \neq k$ ) равна нулю, то для амплитуд  $C_k$ , соответствующих моментам времени  $t + \Delta t$  и  $t$ , выполняется равенство:

$$|C_k(t + \Delta t)|^2 = |(1 + T_{k,k} \Delta t)C_k(t)|^2 = |C_k(t)|^2,$$

то есть

$$(1 + T_{k,k}^* \Delta t)(1 + T_{k,k} \Delta t) = 1 + T_{k,k}^* \Delta t + T_{k,k} \Delta t + |T_{k,k}|^2 \Delta t^2 = 1.$$

Пренебрегая членом с  $\Delta t^2$  при  $\Delta t \rightarrow 0$ , получим

$$T_{k,k}^* = -T_{k,k}, \quad (13)$$

что возможно при  $T_{k,k}$ , имеющем мнимую единицу только в качестве множителя. Следовательно, величины  $H_{k,k}$  в (12) действительные.

Очевидно, что полное число матричных элементов  $H_{j,k}$ , необходимое для описания динамики системы, также равно  $N^2$ . Матрица, составленная из  $H_{j,k}$ , называется *гамильтоновой, или энергетической, матрицей*. Смысл последнего будет ясен из дальнейшего.

Итак, для характеристики изменений состояния (7) во времени необходимо знать  $N^2$  матричных элементов  $H_{j,k}$ .

Сформулируем правило для определения амплитуды вероятности перехода между базисными состояниями.

Если в момент времени  $t$  вероятность нахождения системы в состоянии  $|k\rangle$  не равна единице, а характеризуется амплитудой вероятности  $C_k(t)$ , то амплитуда вероятности перехода системы из состояния  $|k\rangle$  в любое другое состояние  $|j\rangle$  пропорциональна  $C_k(t)$ , т. е. равна

$$\left( \delta_{jk} - \frac{i}{\hbar} H_{j,k} \Delta t \right) \cdot C_k(t). \quad (14)$$

Найдем величины  $C_k$  в момент времени  $t + \Delta t$ , если они известны для момента времени  $t$ . Для этого предположим, что нам известны все значения  $H_{j,k}$ .

$$C_k(t + \Delta t) = \frac{-i}{\hbar} H_{k,1} \Delta t \cdot C_1(t) + \dots + \left( 1 - \frac{i}{\hbar} H_{k,k} \Delta t \right) \cdot C_k(t) + \dots + \frac{-i}{\hbar} H_{k,N} \Delta t \cdot C_N(t).$$

Перенесем в левую часть  $C_k(t)$  из центрального слагаемого и разделим все уравнение на  $-i/\hbar$ . Тогда это уравнение примет вид:

$$i\hbar \frac{C_k(t + \Delta t) - C_k(t)}{\Delta t} = H_{k,1} \cdot C_1(t) + \dots + H_{k,k} \cdot C_k(t) + \dots + H_{k,N} \Delta t \cdot C_N(t). \quad (15)$$

Так как дробь в левой части (15) при  $\Delta t \rightarrow 0$  представляет производную, то (15) можно записать в виде:

$$i\hbar \frac{\partial C_k(t)}{\partial t} = \sum_j H_{k,j} \cdot C_j(t). \quad (16)$$

Уравнения, образующие систему (16) для всех  $C_k(t)$ , определяют свойства и динамику квантовомеханических систем и называются уравнениями движения.

### 3.1 Стационарные состояния

**Стационарным состоянием** системы или частицы, описываемой волновой функцией

$$|\Psi\rangle = \sum_k c_k |k\rangle, \quad (17)$$

назовем такое состояние, для которого не только все значения  $|C_k(t)|^2$ , но и разности фаз между любыми  $C_k(t)$  и  $C_j(t)$  не зависят от времени. Это возможно лишь в том случае, когда все  $C_k(t)$  одинаково зависят от времени.

Итак, для двух моментов времени  $t_0$  и  $t_0 + t$

$$|\Psi(t_0 + t)|^2 = |\Psi(t_0)|^2$$

Это равенство выполняется при условии

$$\Psi(t_0 + t) = \Psi(t_0) e^{-i\frac{E}{\hbar}t}. \quad (18)$$

Так как рассматриваемое состояние стационарное, фазовый множитель  $e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$  содержит величину  $E$ , одинаковую для всех моментов времени  $t$ , т.е.  $E$  – сохраняющаяся величина, характеризующая данное состояние. При анализе конкретных состояний выясняется, что  $E$  соответствует классическому понятию энергии системы.

Итак, в стационарных состояниях все  $C_k$  в (17) должны одинаково зависеть от времени, т.е.

$$C_k(t) = b_k e^{-i\frac{E}{\hbar}t}, \quad (19)$$

где  $b_k$  – величина, не зависящая от времени.

Соотношения (18), (19) позволяют придать ясный физический смысл величинам  $H_{kk}$ . Если система находится в состоянии  $|k\rangle$ , и амплитуды вероятностей переходов во все другие состояния  $|j\rangle$  равны нулю, то она находится в стационарном состоянии, описываемом функцией  $|\Psi\rangle = c_k |k\rangle$ . В этом случае система уравнений (16) состоит из одного уравнения:

$$i\hbar \frac{\partial C_k}{\partial t} = H_{k,k} \cdot C_k.$$

Решением этого уравнения является

$$C_k(t) = b_k e^{-i\frac{H_{k,k}}{\hbar}t}. \quad (20)$$

При сравнении (20) и (19) приходим к выводу, что диагональный матричный элемент  $H_{k,k}$  является энергией системы в базисном состоянии  $|k\rangle$ , т.е.

$$E_k = H_{k,k}.$$

Для стационарных состояний система дифференциальных уравнений (16) превращается в систему однородных алгебраических уравнений. Действительно, после подстановки в (16) значений  $C_k$  из (19), получаем

$$H_{k,1} b_1 + H_{k,2} b_2 + \dots + H_{k,k} b_k - E b_k + \dots + H_{k,N} b_N = 0. \quad (21)$$

Эта система имеет нетривиальное решение относительно  $E$  и соответствующего набора коэффициентов  $\{b_j(E)\}$ , если детерминант этой системы равен нулю, т. е.

$$\det|H_{j,k} - E \cdot \delta_{jk}| = 0. \quad (22)$$

Уравнение (22) называется **вековым**, или **секулярным, уравнением**. После решения этого уравнения  $N$ -й степени относительно  $E$  получается  $N$  значений энергий для  $N$  стационарных состояний. Для каждого значения  $E_i$  из (21) находят значения всех  $b_j(E)$  при условии, что

$$\sum_{k=1}^N |b_k^{(i)}(E_i)|^2 = 1 \quad (23)$$

Условие (23) соответствует нормировке вероятности на единицу. Здесь следует заметить, что наборы  $\{b_k^{(i)}(E_i)\}$  соответствуют не только нормированным, но и ортогональным друг к другу состояниям.

#### 4 УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

В 1926 году Шредингер написал уравнение, позволяющее точно и подробно рассчитывать амплитуды вероятности, определяющие свойства микро-частиц. Этот момент времени можно считать рождением квантовой механики, которая рассматривает поведение микро-частиц в тех случаях, когда ни корпускулярный, ни волновой подходы не достаточны для трактовки событий.

Для выяснения смысла уравнения Шредингера рассмотрим задачу описания положения микро-частицы, находящейся в бесконечной трубе, расположенной вдоль оси  $x$ . Для выбора базисных состояний мысленно разделим трубу (рис. 3) на участки длиной  $b$  каждый и пронумеруем их. Тогда базисное состояние  $|k\rangle$  имеет следующий смысл:

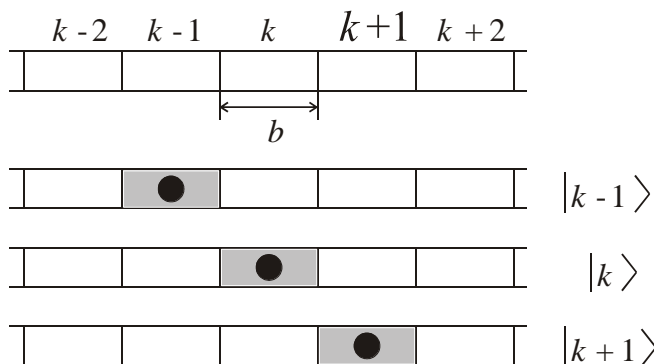


Рис. 3

частица достоверно находится в ячейке трубы с номером  $k$ . Аналогичный смысл имеют и все остальные базисные состояния. Если ячейки не перекрываются, то любому положению частицы можно однозначно поставить в соответствие какое-либо базисное состояние  $|k\rangle$ . Это означает, что выбранный набор базисных состояний является ортогональным.

Любое состояние частицы в трубе может быть охарактеризовано амплитудой вероятности, являющейся линейной комбинацией базисных состояний:

$$|\Psi\rangle = \sum_k c_k |k\rangle. \quad (24)$$

Для  $C_k(t)$  – амплитуды вероятности обнаружить частицу при измерении в ячейке номера  $k$ , справедливо уравнение

$$i\hbar \frac{\partial C_k(t)}{\partial t} = \sum_j H_{k,j} \cdot C_j(t). \quad (25)$$

В данном случае (25) представляет совокупность бесконечного числа уравнений, в которых суммирование в правой части ведется также по бесконечному числу базисных состояний. Однако, как показывает тщательный анализ, правые части в (25) содержат всего по три неравных нулю слагаемых. Во-первых, это слагаемое с  $H_{k,k}$ , имеющим смысл энергии частицы в базисном состоянии  $|k\rangle$ .

Полная энергия частицы в каждом базисном состоянии может быть представлена как сумма собственной энергии ( $E_0$ ) частицы и ее потенциальной энергии ( $V_k$ ), различной для разных ячеек:

$$H_{k,k} = E_0 + V_k. \quad (26)$$

Во-вторых, амплитуды вероятности  $H_{k,j}$  не равны нулю только для соседних ячеек, т. е. из ячейки  $|k\rangle$  частица может непосредственно перейти только в соседние ячейки: влево, в ячейку  $k - 1$ , и вправо, в ячейку  $k + 1$  (см. рис. 3). Итак,

$$H_{k,k+1} \neq 0; H_{k,k-1} \neq 0; H_{k,k\pm i} = 0 \quad \text{при} \quad i = 2, 3, 4, \dots$$

Это заключение следует из принципа локальности, утверждающего, что если частица исчезла в момент времени  $t$  в точке  $\vec{R}$ , то она должна возникнуть в момент времени  $t + \Delta t$  в точке  $\vec{R} + \Delta \vec{R}$ , где  $\Delta \vec{R} \rightarrow 0$  при  $\Delta t \rightarrow 0$ . Принцип локальности является следствием теории относительности и принципа причинности. Если бы это было не так, то в других движущихся системах отсчета частица могла бы возникнуть в другой точке раньше, чем исчезнуть в первой; частица одновременно могла бы существовать и в первой и второй точках, были бы интервалы времени, когда она не существовала бы ни в одной из точек пространства.

Примем, что амплитуда вероятности перехода между соседними ячейками не зависит ни от направления, ни от величины градиента потенциальной энергии частицы, т. е. для любого  $k$

$$H_{k+1,k} = H_{k,k+1} = -A. \quad (27)$$

При учете (26) и (27) уравнение (25) принимает вид:

$$i\hbar \frac{\partial C_k(t)}{\partial t} = -AC_{k-1} + [E_0 + V_k]C_k - AC_{k+1}. \quad (28)$$

Система бесконечного числа уравнений (28) может быть сведена к одному дифференциальному уравнению второго порядка. Для этого в правой части (28) прибавим и вычтем величину  $2AC_k$  и запишем (28) в следующем виде:

$$i\hbar \frac{\partial C_k(t)}{\partial t} = [E_0 + V_k - 2A]C_k - A[C_{k+1} - C_k - C_k + C_{k-1}]. \quad (29)$$

Как видно из рис. 4, при уменьшении  $b$  до нуля разности  $C_{k+1} - C_k$  и  $C_k - C_{k-1}$  будут превращаться в производные, умноженные на  $b$ , а все выражение в фигурных скобках в (29) превратится во вторую производную, умноженную на  $b^2$ .

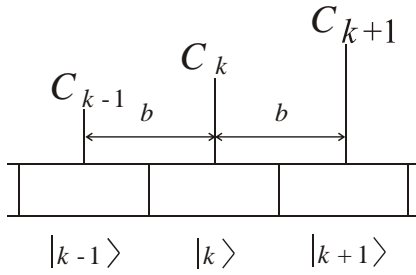


Рис. 4

$$b^2 \frac{d^2 C(x, t)}{dt^2}. \quad (30)$$

Очевидно, что при этом ячейки удобно характеризовать не дискретными числами, а координатой  $x$ . Итак,

$$i\hbar \frac{\partial C(x, t)}{\partial t} = [E_0 + V(x) - 2A] C(x, t) - Ab^2 \frac{d^2 C(x, t)}{dt^2}. \quad (31)$$

Выражение (31) будет иметь смысл только тогда, когда произведение  $Ab^2$  будет стремиться к некоторой постоянной величине при стремлении  $b$  к нулю, т. е. значение амплитуды  $A$  при этом должно стремиться к бесконечности. Предположим, что

$$Ab^2 = \frac{\hbar^2}{2m}, \quad (32)$$

где физическую величину, характеризующую инертные свойства частицы, по аналогии с классической физикой назовем массой  $m$  частицы.

Проанализируем первое слагаемое в правой части (31). При уменьшении размера ячейки до нуля ( $b \rightarrow 0$ ) величины  $2A$  и  $E_0$  стремятся к бесконечности. Поэтому выберем ноль отсчета собственной энергии частицы так, чтобы

$$E_0 - 2A = 0. \quad (33)$$

То, что разность  $E_0 - 2A$  может быть конечной, вытекает из следующих рассуждений. Величина  $A$  при стремлении  $b$  к нулю стремится к бесконечности как  $1/b^2$  (32). Из соотношения неопределенностей (см. с. 27)  $\Delta P_x b = \hbar$  вытекает, что  $\Delta P_x = \hbar/b$ , а так как кинетическая энергия частицы пропорциональна квадрату импульса, то и энергия частицы при этом стремится к бесконечности пропорционально  $1/b^2$ . Итак, оба слагаемых в соотношении (33) одинаково стремятся к бесконечности при  $b \rightarrow 0$ , и, следовательно, равенство (33) не лишено смысла.

При определениях (32) и (33) уравнение (31) принимает вид:

$$i\hbar \frac{\partial C(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 C(x, t)}{dt^2} + V(x) C(x, t). \quad (34)$$

Это уравнение называется **уравнением Шредингера**. Оно описывает на базисе координат (в  $x$ -представлении) динамику любого состояния микросистемы в одномерном случае.

При уменьшении размера ячейки до нуля положение частицы определяется координатой  $x$ , и амплитуду вероятности (24), характеризующую состояние частицы, принято записывать в виде

$$|\Psi\rangle = C(x, t)|x\rangle. \quad (35)$$

Тогда состояние частицы характеризуется функцией  $C(x, t)$ , которая называется волновой. Значения этой функций являются амплитудами вероятности обнаружить частицу в координате  $x$  в момент времени  $t$ .

В том случае, когда микросистема находится в стационарном состоянии, т.е. имеет определенную энергию  $E$ , зависимость  $C(x, t)$  от времени определяется в соответствии с (19) выражением

$$C(x, t) = \varphi(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}. \quad (36)$$

Здесь  $E$  – энергия частицы в стационарном состоянии,  $\varphi(x)$  — волновая функция, не зависящая от времени.

Подставив (36) в (34), получим

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} = [V(x) - E] \varphi(x). \quad (37)$$

Уравнение (37) называется стационарным уравнением Шредингера, так как оно описывает состояния с определенной энергией, в которых вероятность обнаружить частицу в координате  $x$  одинакова для любого момента времени.

Стационарное уравнение Шредингера для трехмерного движения частицы имеет вид

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi(\vec{r})}{d\vec{r}^2} = [V(\vec{r}) - E] \varphi(\vec{r}). \quad (38)$$

С помощью волновых функций, полученных при решении этого уравнения, объясняются все атомные явления, кроме связанных с теорией относительности и магнетизмом. Аналитические решения возможны для небольшого числа зависимостей  $V(\vec{r})$  при движении одной частицы во внешнем потенциале. В остальных случаях приближенные решения получаются в результате длительных расчетов на современных ЭВМ.

Однако основные возможности этого уравнения и основные свойства поведения микрочастиц можно понять, анализируя одномерное движение микрочастиц с помощью уравнения (37).

Итак, приступим к анализу уравнения Шредингера в случае одномерного движения микрочастиц.

## 5 АНАЛИЗ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

### 5.1 Свободная частица

Рассмотрим одномерное движение частицы при отсутствии внешних сил (свободная частица). Очевидно, что в этом случае потенциальная энергия частицы одинакова во всех точках, и ее значение можно принять за ноль отсчета потенциальной энергии, т. е. положить  $V(x) = 0$  для всех  $x$ . Тогда уравнение Шредингера имеет вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} = E \varphi(x). \quad (39)$$

Решением этого уравнения является комплексная функция вида

$$\varphi(x) = A e^{ikx} = A(\cos kx - i \sin kx), \quad (40)$$

где  $k$  – волновое число, определяющее частоту осцилляций функции  $\varphi(x)$ . Очевидно, что уравнению (39) удовлетворяют и функции

$$\varphi_1(x) = A \sin kx \quad \text{и} \quad \varphi_2(x) = A \cos kx. \quad (41)$$

Однако (40) является общим решением уравнения (39), учитывающим эквивалентность всех точек пространства. Подставив (40) в (39), получим

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (42)$$

Так как в рассматриваемом случае частица обладает только кинетической энергией, то формула (42) связывает кинетическую энергию частицы с волновым числом  $k$ , характеризующим частоту осцилляции волновой функции  $\varphi(x)$  в пространстве. Из сравнения (42) с классическим выражением кинетической энергии через импульс тела

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad (43)$$

получаем, что импульс свободной частицы

$$p = \hbar k. \quad (44)$$

Положительные значения  $k$  соответствуют движению в положительном направлении оси  $x$ , а отрицательные – движению в противоположном направлении.

Так как волновое число связано с длиной волны волновой функции (40) соотношением

$$k = 2\pi/\lambda, \quad (45)$$

то кинетическая энергия частицы может быть выражена и через длину волны функции  $\varphi(x)$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2} = \frac{h^2}{2m\lambda^2}, \quad (46)$$

где  $h = 2\pi\hbar$ .

Следовательно, чем меньше длина волны  $\lambda$ , тем больше кинетическая энергия частицы. Зависимость волновой функции (40) от  $x$  нельзя изобразить на графике, однако, порознь действительную и мнимую части этой функции можно нарисовать. Такие зависимости мнимой части  $\varphi(x) = \text{Im}(\varphi)$  – в (40) для различных значений  $k$  изображены на рис. 5.

Итак, чем больше кинетическая энергия частицы, тем большее число осцилляций делает волновая функция  $\varphi(x)$  в определенной области пространства. Эту взаимосвязь кинетической энергии частицы с числом осцилляций волновой функции вдоль оси  $x$  мы будем использовать и для случаев переменной потенциальной энергии, хотя при этом и теряется понятие длины волны для



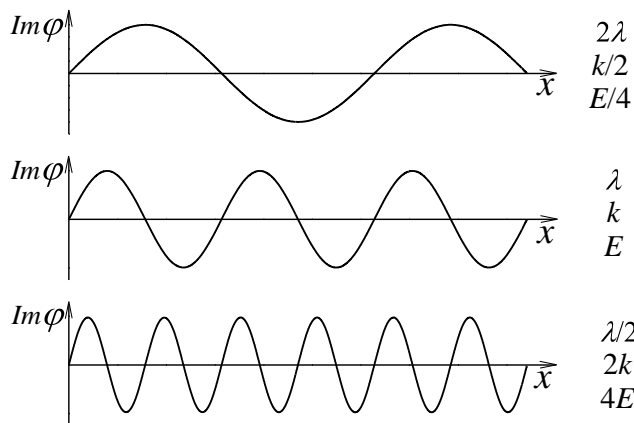


Рис. 5

функции  $\varphi(x)$  для тех областей пространства, в которых кинетическая энергия значительно изменяется.

Наиболее точно связь длины волны и волнового числа функции  $\varphi(x)$  с энергией частицы, указанная на рис. 5, будет выполняться для областей с постоянным потенциалом, где волновое число  $k$  и длина волны  $\lambda$  будут определяться кинетической энергией в соответствии с (46).

Как видно из (40), вероятность ( $W$ ) обнаружения частицы одинакова во всех точках  $x$ , т. е.

$$W = |\varphi(x)|^2 = A^2 e^{-ikx} e^{ikx} = A^2$$

Это отражает тот факт, что для свободной частицы все точки пространства эквивалентны.

Следует обратить внимание на то, что понятие импульса может существовать только для свободной частицы, так как только в этом случае кинетическая энергия (42) квантовой частицы имеет формулу, симметричную классической формуле (43). Только в этом случае волновая функция может характеризоваться определенным значением волнового числа  $k$  и определенным значением длины волны  $\lambda$ , которые одинаковы для всех точек пространства и, следовательно, являются характеристиками состояния частицы.

С учетом соотношения (36) полная волновая функция свободной частицы имеет вид

$$\Psi(x,t) = A e^{-i(\omega t - kx)}, \quad (47)$$

и частота осцилляций амплитуды вероятности  $\Psi(x,t)$  во времени связана с энергией частицы  $E$  соотношением

$$E = \hbar\omega. \quad (48)$$

Из (47) следует, что плотность вероятности встретить частицу в любой точке  $x$  одинакова и не зависит от времени  $t$ .

Следует обратить внимание на то, что зависимость амплитуды вероятности свободной частицы в стационарном состоянии от времени и координаты (47) отражает свойства симметрии пространства, заложенные в уравнения Шредингера, и может быть получена без уравнения (34). Покажем, как это делается.

Рассмотрим стационарное состояние свободной частицы. Если исходить из того, что изменение амплитуды вероятности  $\varphi(x)$  при сдвиге во времени от  $t_0$  до  $t_0 + t$  должно быть одинаково для любого момента времени  $t$ , то получим

$$\Psi(x, t_0 + t) = \Psi(x, t_0) e^{-i\omega t}, \quad (49)$$

где  $\omega = E/\hbar$  – величина, определяющая зависимость  $\Psi$  от  $t$ , одинакова для любого момента времени  $t$ , и, следовательно, является характеристикой стационарного состояния.

Если исходить из того, что изменение амплитуды вероятности  $\Psi(x, t)$  при сдвиге вдоль оси  $x$  от  $x_0$  до  $x_0 + x$ , должно быть одинаково для любого  $x_0$ , то получим

$$\Psi(x_0 + x, t) = \Psi(x_0, t) e^{ikx}, \quad (50)$$

где  $k$  – величина, определяющая зависимость  $\Psi$  от  $x$ , – одинакова для любой координаты  $x_0$ , и, следовательно, также является характеристикой состояния.

Обобщая (49) и (50), при  $t_0 = 0$  и  $x_0 = 0$ , получим

$$\Psi(x, t) = Ae^{-i(\omega t - kx)},$$

что совпадает с(47).

Уравнение Шредингера позволяет придать физический смысл величинам  $\omega$  и  $k$ , характеризующим осцилляции волновой функции  $\Psi(x, t)$  во времени и в пространстве. Как уже говорилось, тщательный анализ показал, что  $\omega$  характеризует энергию, а  $k$  – импульс частицы в стационарном состоянии в соответствии с соотношениями

$$E = \hbar\omega \quad \text{и} \quad p = \hbar k.$$

## 5.2 Частица с потенциальной энергией

Рассмотрим одномерное движение частицы в случае зависимости потенциальной энергии от  $x$ . Выясним, как из уравнения

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + V(x)\varphi(x) = E\varphi(x), \quad (51)$$

описывающего стационарные состояния с энергией  $E$ , вытекают такие квантовые эффекты, как наличие локализованных состояний только при определенных значениях энергии частицы, возможность квантовым частицам проникать сквозь потенциальный барьер, невозможность ядрам атомов в молекулах покоиться относительно друг друга и т. д.

## 5.3 Энергия частицы

Для получения уравнения (51) мы использовали в качестве базисных состояний, состояния с частицей, находящейся в точке  $x$ , где она имеет потенциальную энергию  $V(x)$ . Истинное же состояние частицы с определенной энергией  $E$  описывается вектором  $|\Psi\rangle = \varphi(x)|x\rangle$ , т. е. частица имеет амплитуды вероятности  $\varphi(x)$  одновременно находиться во всех точках  $x$  пространства.

Выберем в качестве модели частицы, находящейся в стационарном состоянии, частицу, делокализованную по всему пространству. При этом доля частицы, находящаяся в интервале  $dx$  вблизи  $x$ , равна  $|\varphi(x)|^2 dx$  и не зависит от времени.

Если уравнение (51) умножить на  $\varphi^*(x)$ , то получим

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \varphi^*(x) \varphi''(x) + V(x) |\varphi(x)|^2 \right) dx = E |\varphi(x)|^2 dx. \quad (52)$$

Первое слагаемое следует трактовать как часть кинетической энергии частицы, которая находится в интервале  $dx$  вблизи координаты  $x$ . Второе слагаемое – это часть потенциальной энергии этой же частицы. Правая часть уравне-

ния (52) представляет часть полной энергии частицы, которой обладает доля  $|\varphi(x)|^2 dx$  частицы. Если проинтегрировать уравнения (52) по всему пространству, то с учетом того, что  $\int |\varphi(x)|^2 dx = 1$ , получим

$$\int \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \varphi^*(x) \varphi''(x) + V(x) |\varphi(x)|^2 \right) dx = E.$$

Здесь первое слагаемое – кинетическая энергия частицы, второе – потенциальная энергия, и каждое слагаемое имеет постоянное, не изменяющееся со временем, значение.

Итак, частица в стационарном состоянии имеет определенные значения полной, потенциальной и кинетической энергии:

$$E = E_k + E_n,$$

$$\text{где } E_k = \int \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \varphi^*(x) \varphi''(x) \right) dx; \quad E_n = \int V(x) |\varphi(x)|^2 dx. \quad (53)$$

Эта особенность отдаёт предпочтение в данном случае модели размытой частицы перед моделью точечной целой частицы, находящейся с вероятностью  $|\varphi(x)|^2 dx$  на участке  $dx$ . Вторая модель вызывает ощущение существования понятия координаты для частицы в недетерминированном состоянии, описываемом функцией  $\varphi(x)$ , и того, что соотношение между кинетической и потенциальной энергией различается для разных моментов времени и разных положений частицы. Модель целой частицы переводит недетерминированное состояние частицы в класс неопределенных, и при этом базисные состояния и их характеристики приобретают излишне реалистический смысл, что способствует некоторым неверным заключениям.

Безусловно, всегда надо помнить, что попытка трактовать волновую функцию, вводя какие-то более глубокие понятия, является некорректной, так как саму волновую функцию следует считать основным, более фундаментальным, чем любое другое, понятием, характеризующим недетерминированное состояние микрочастицы.

#### 5.4 Графическое решение уравнения Шредингера

Уравнение (51) может быть записано в виде:

$$\frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} = F(x) \varphi(x). \quad (54)$$

Тогда оно утверждает, что вторая производная амплитуды вероятности  $\varphi''(x)$ , пропорциональна самой амплитуде вероятности с коэффициентом пропорциональности

$$F(x) = V(x) - E \frac{2m}{\hbar^2}.$$

В тех областях, где  $F(x)$  имеет отрицательные значения ( $V(x) < E$ ), уравнение (54) имеет решение в виде зависимости от  $x$  комбинаций функций  $\sin kx$  и  $\cos kx$  с разными  $k$ . Такие функции всегда вогнуты к оси  $x$ , подобно кривым на

рис. 6, а. В этих случаях частица находится в базисных состояниях с положительной кинетической энергией, и частота осцилляций  $\varphi(x)$  вдоль оси  $x$  определяется кинетической энергией в соответствии с соотношением

$$E - V(x) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}.$$

Поскольку длина волны  $\varphi(x)$  может существенно изменяться на расстояниях порядка самой длины волны, то это соотношение может быть использовано только как оценочное.

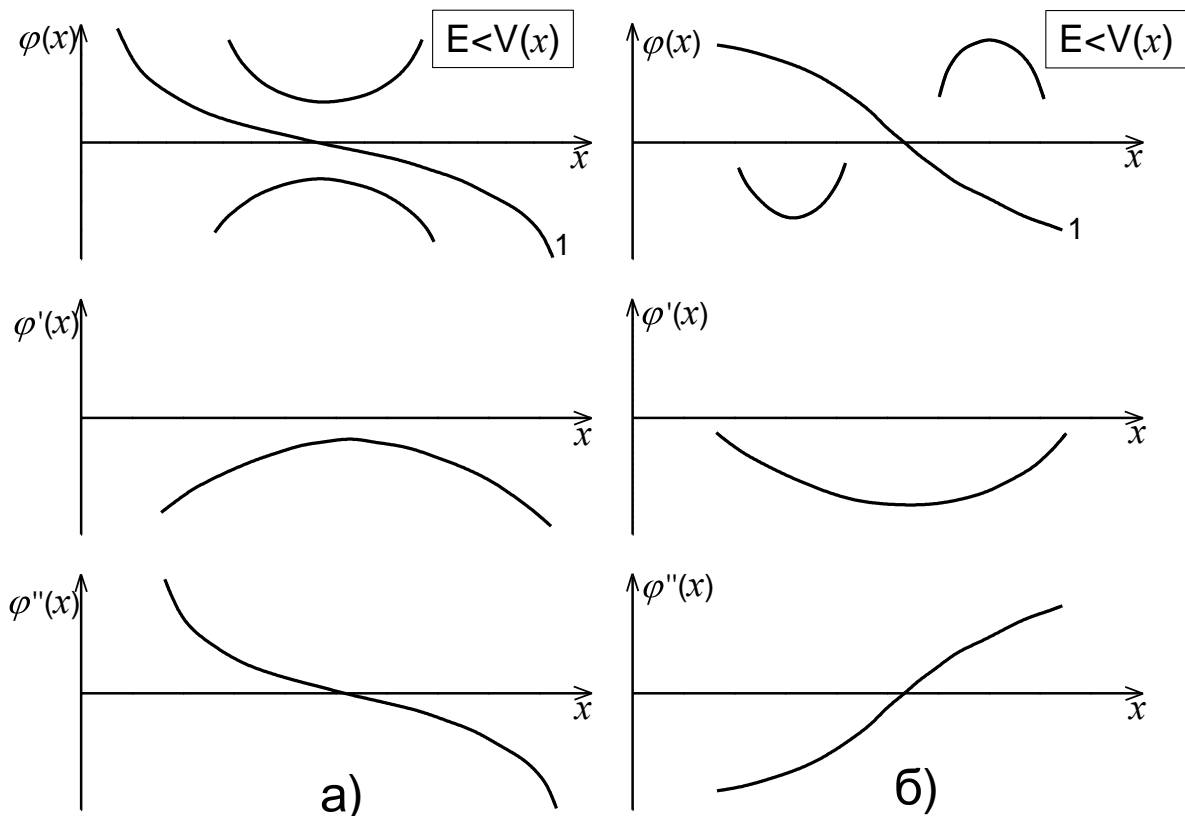


Рис. 6

В тех областях пространства, где  $F(x)$  имеет положительное значение ( $V(x) > E$ ),  $\varphi''(x)$  имеет тот же знак, что и  $\varphi(x)$ . Следовательно, кривая  $\varphi(x)$  должна быть повернута выпуклостью к оси  $x$ , и качественно следовать ходу экспоненты с положительной или отрицательной степенью  $e^{\pm \alpha x}$ . Это означает, что на этих участках  $\varphi(x)$  должна быть похожа за одну из кривых рис. 6, б. На этом же рисунке показаны  $\varphi'(x)$  и  $\varphi''(x)$  для кривых 1.

## 5.5 Несвязанные состояния

На рис. 7 показана примерная зависимость  $\varphi(x)$  в области с переменной потенциальной энергией для частицы, полная энергия которой для всех  $x$  больше потенциальной в соответствующих базисных состояниях. Так как в каждой координате выполняется равенство  $E = E_k + E_p$ , то вертикальные стрелки имеют длину, равную кинетической энергии в соответствующих базисных состояниях.

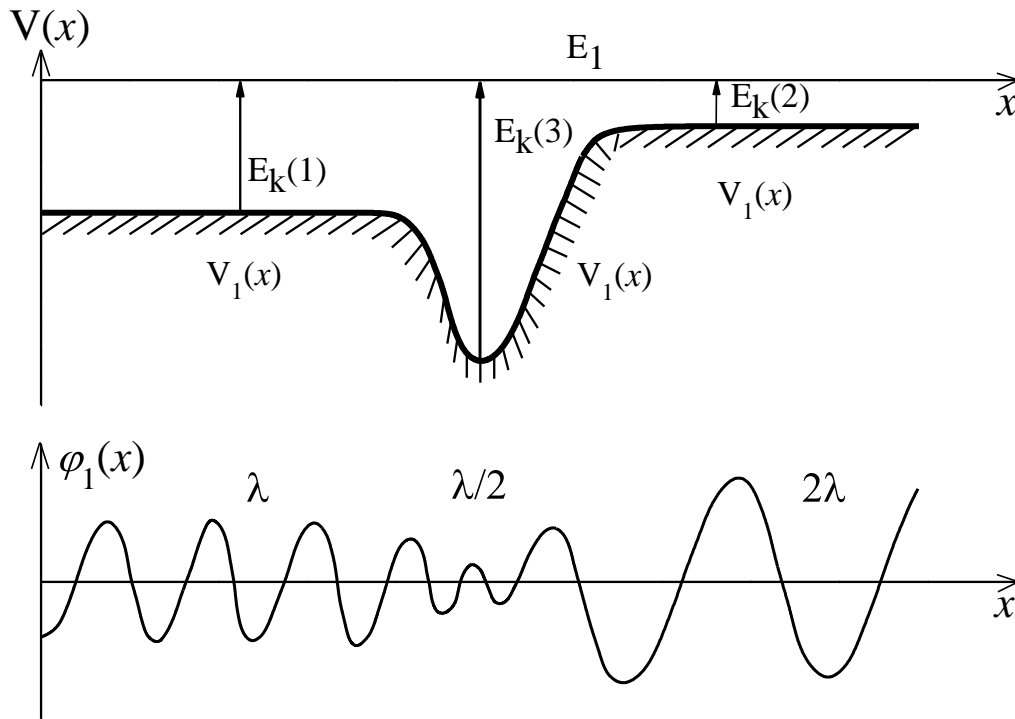


Рис. 7

Слева от потенциальной ямы  $E_k(1)$  в четыре раза больше, чем  $E_k(2)$  в области справа от ямы. Поскольку на этих участках потенциальная энергия постоянна, то решения уравнения (51) представляют гармонические функции с длинами волн  $\lambda_1$  и  $2\lambda_1$ , соответственно. В области потенциальной ямы кинетическая энергия переменная, но она больше, чем  $E_k(1)$  и  $E_k(2)$ , следовательно, осцилляции волновой функция в этой области должны происходить с меньшей средней длиной волны.

Похожие соотношения будут выполняться между длинами волн в этих трех областях для всех  $\varphi(x)$ , соответствующих состояниям с  $E > V_2(x)$ .

Следует обратить внимание, что при  $E > V_2$  никогда не может получаться связанного состояния, т. е. не может быть, чтобы амплитуда вероятности отличалась от нуля только в ограниченной области пространства. Это связано с тем, что для  $E > V_2$  волновая функция имеет гармонический вид, будучи все время обращена вогнутостью к оси  $x$ , что также легко видеть из рис. 7.

В рассмотренном случае поведение квантовой частицы похоже на поведение классической частицы в области с соответствующим рельефом потенциальной энергии. Классическая частица будет двигаться сравнительно медленно в области  $V_2(x)$ , со скоростью в два раза большей в области  $V_1(x)$  и быстрее всего в области потенциальной ямы, ускоряясь при приближении ко дну ямы и замедляясь, выходя из нее. Такое соотношение между скоростями позволяет утверждать, что самая маленькая вероятность встретить частицу будет в районе дна потенциальной ямы, так как частица проходит эту область с самой большой скоростью и затрачивает на ее прохождение относительно маленький интервал времени.

Для микрочастицы с  $E > V_2(x)$  между вероятностями  $P(V_2)$  обнаружения ее на участке одинаковой длины  $dx$  в областях  $V_1$ ,  $V_2$  и  $V_3$  всегда выполняются соотношения  $P(V_2) > P(V_1) > P(V_3)$ .

В состоянии  $\varphi_1(x)$  у частицы определенные полная, кинетическая и потенциальная энергии, но нет определенного положения  $x$  и определенного импульса  $p$ .

Когда мы говорим об импульсе микрочастицы, то должны указать волновое число  $k$  и соответствующую длину волны  $\lambda$ . Как видно из рис. 7,  $\varphi_1(x)$  не имеет определенной длины волны и на базисе импульса  $|p_i\rangle$  состояние частицы будет описываться амплитудой вероятности  $|\Psi\rangle = \sum C_i |p_i\rangle$ , где  $C_i$  – амплитуда вероятности обнаружить у частицы с энергией  $E_i$  импульс величиной  $p_i$ . Итак, для состояния  $\varphi_1(x)$  кинетическую энергию нельзя представить формулой  $E = p^2/2m$ , где  $p$  имеет определенное значение.

### 5.6 Частица в потенциальной яме

Рассмотрим поведение волновой функции микрочастицы в области вблизи  $x_1$  и  $x_2$ , если ее энергия равна  $E_1$  (рис. 8).

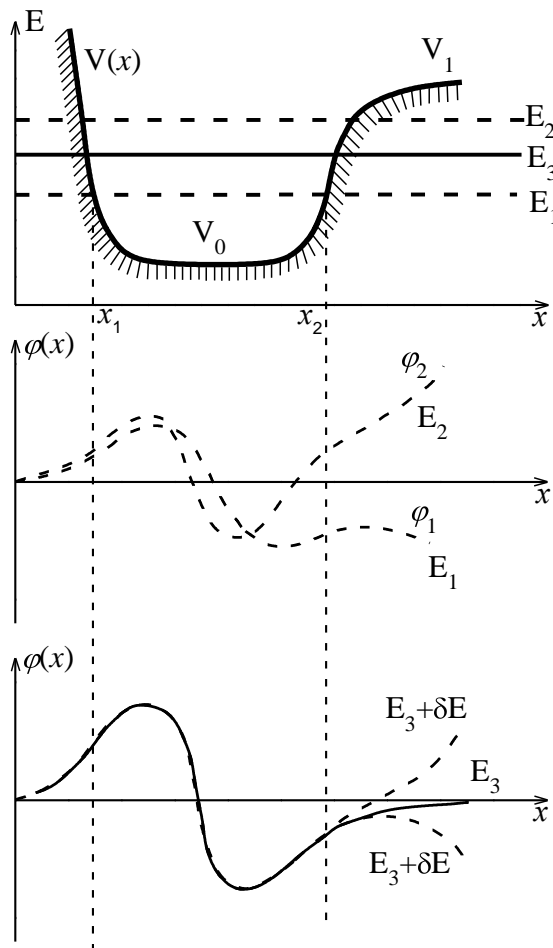


Рис. 8

Рассмотрим для этого микрочастицу с энергией  $E_1$ . Выделим три области вдоль оси  $x$ .

Первая – левее точки  $x_1$ , вторая – правее точки  $x_2$ . В этих областях полная энергия  $E_1$  рассматриваемой частицы меньше потенциальной энергии. В третьей области – между  $x_1$  и  $x_2$ , полная энергия частицы больше потенциальной.

Если бы в этой потенциальной яме двигалась классическая частица, то ее движение происходило бы следующим образом. Там, где потенциальная энергия постоянна, частица двигалась бы с постоянной скоростью. При приближении к точкам  $x_1$  и  $x_2$  скорость частицы уменьшалась бы до нуля, и затем, после остановки, она двигалась бы в противоположном направлении, т. е. совершала бы колебательное движение.

Итак, классическая частица с энергией  $E_1$  не может проникнуть в области левее  $x_1$  и правее  $x_2$ . Очевидно также, что в классической механике нет никаких ограничений на энергию частицы, движущейся в этой потенциальной яме. Если  $E < V_1$ , то возможно любое значение энергии в интервале от  $V_0$  до  $V_1$ .

Выясним, как описываются в аналогичных случаях состояния с определенной энергией для микро-

Если вероятность встретить частицу далеко слева от точки  $x_1$  равна нулю, то амплитуда вероятности ведет себя по мере приближения к точке  $x_1$  так, как показано на рис. 8, т.е. обращена выпуклостью к оси  $x$ . В точке  $x_1$  вторая производная  $\varphi_1(x)$  равна нулю, поскольку в этой точке  $V(x) = E_1$ , и кривизна  $\varphi_1(x)$  меняет знак.

На участке между  $x_1$  и  $x_2$  амплитуда вероятности может сделать несколько осцилляций, но во всех точках должна быть обращена вогнутостью к оси  $x$ , и в точке  $x_2$  кривизна  $\varphi_1(x)$  опять меняет знак. Для  $x > x_2$  амплитуда вероятности будет представлять собой кривую, обращенную выпуклостью к оси  $x$  (см. рис. 8). Поскольку кривизна  $\varphi_1(x)$  не меняет знака для  $x > x_2$ , то кривая  $\varphi_1(x)$  больше никогда не пересечет ось  $x$  и будет непрерывно убывать при удалении вправо.

Итак, стационарное состояние с энергией  $E_1$  описывается амплитудой вероятности (кривая  $\varphi_1$  на рис. 8), которая соответствует несвязанному состоянию частицы, так как наиболее вероятно обнаружить частицу не в потенциальной яме, а далеко справа от  $x_2$ .

Предположим, что частица имеет энергию  $E_2$ . Тогда амплитуда вероятности  $\varphi_2(x)$  имеет вид кривой  $\varphi_2$ . В этом случае амплитуда в области  $x > x_2$  уходит в плюс бесконечность, и опять наиболее вероятно обнаружить частицу справа от  $x_2$ .

Такое явление будет наблюдаться почти при всех значениях энергии частицы. Классической физикой не моделируется способность частицы проникать в область с отрицательной кинетической энергией. Мы получили одну из особенностей микрочастиц, не имеющих аналога в макромире.

## 5.7 Связанные состояния

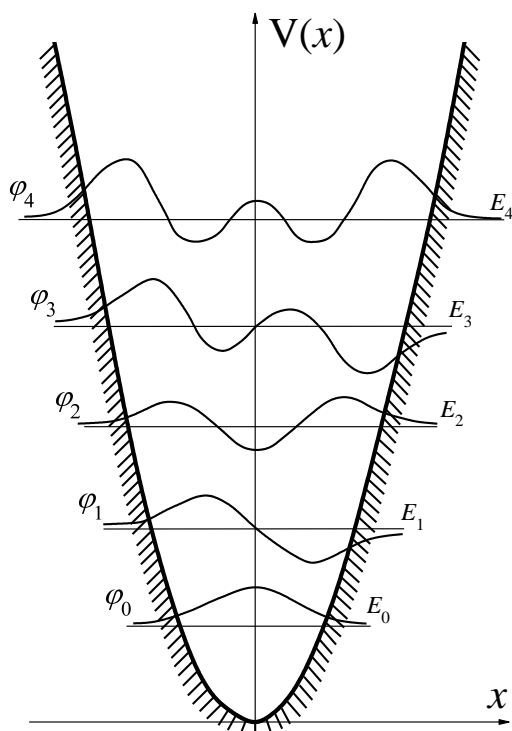


Рис. 9

Обратим внимание на то, что на рис. 8 амплитуда вероятности при энергии частицы  $E_1$  уходит в минус бесконечность, а при энергии  $E_2$  – в плюс бесконечность. Оказывается, что для одного из значений энергии  $E_3$  в интервале между  $E_1$  и  $E_2$  амплитуда при возрастании  $x$  не уходит в бесконечность, а имеет вид кривой  $\varphi_3$ , т.е. заметно отлична от нуля только в области между  $x_1$  и  $x_2$ . Следовательно, в этой области отличается от нуля и вероятность обнаружения частицы. Если же энергию частицы изменить относительно  $E_3$  на сколь угодно малую величину  $dE$ , то амплитуда вероятности ее обнаружения за пределами потенциальной ямы сразу резко возрастает, и такую частицу вероятнее всего обнаружить далеко за пределами потен-

циальной ямы (кривые  $E_3 \pm dE$  на рис. 8), хотя ее энергия будет много меньше вершины потенциальной ямы. Даже малейшее отклонение от  $E_3$  приведет к тому, что  $\varphi(x)$  с ростом  $x$  уйдет в бесконечность.

Оказывается, что обычно имеется несколько разрешенных энергий, при которых частица локализована в области потенциальной ямы. Качественный вид амплитуд вероятностей для нескольких энергий внутри потенциальной ямы, имеющей форму  $V(x) = \alpha x^2$ , показан на рис. 9. При этом существует общее правило: чем больше осцилляций делает  $\varphi_k(x)$ , тем больше полная энергия частицы, находящейся в состоянии  $k$ . Так, для наименьшей возможной энергии амплитуда имеет только один максимум внутри ямы, для второго значения энергия – два, для третьего – три и т. д.

Итак, мы выяснили, что только при определенных энергиях стационарного состояния имеется заметная вероятность обнаружить частицу в потенциальной яме при нулевой вероятности обнаружения ее далеко за пределами ямы.

### 5.8 Основное состояние частицы в потенциальной яме

Как видно из проведенного анализа, частица, находящаяся в потенциальной яме в состоянии с наименьшей энергией, обязательно обладает кинетической энергией, т. е. частица никогда не имеет полной энергии, равной значению, соответствующему дну потенциальной ямы. Таким образом, в основном состоянии у частицы есть движение, которое часто называют нулевыми колебаниями. Оценку средней кинетической энергии системы в основном состоянии можно дать, используя (как видно из рис. 9) то, что это состояние имеет длину волны амплитуды вероятности порядка удвоенной ширины потенциальной ямы вблизи ее дна. Итак,

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\lambda^2} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{4L^2}. \quad (55)$$

Если представлять движение частицы в основном состоянии как колебательное движение около положения равновесия, то следует обратить внимание на принципиальное отличие от движения классического осциллятора. Величина  $|\varphi(x)|^2 dx$  дает вероятность обнаружения частицы в интервале  $dx$  в окрестности точки  $x$  и, следовательно, пропорциональна времени нахождения частицы в этом интервале. Как видно из рис. 9, квантовая частица основное время проводит около положения равновесия, в то время как классическая частица проходит положение равновесия с наибольшей скоростью и находится в этой области сравнительно малую долю времени.

Таким образом, при низких температурах квантовые системы не могут прийти к абсолютному покою, и атомы в молекулах совершают непрерывное движение. Минимальная температура соответствует низшему из возможных стационарных состояний системы.

Обратим внимание на то, что частица во всех связанных состояниях проникает в область, запрещенную для классической частицы законом сохранения энергии. Это явление называется *туннельным эффектом*.



## 5.9 Туннельный эффект

Рассмотрим состояние частицы с определенной энергией  $E_1$  в области, в которой зависимость потенциальной энергии от  $x$  имеет вид, изображенный на рис. 10.

Классическая частица с энергией  $E_1$ , помещенная или в область левее  $x_1$ ,

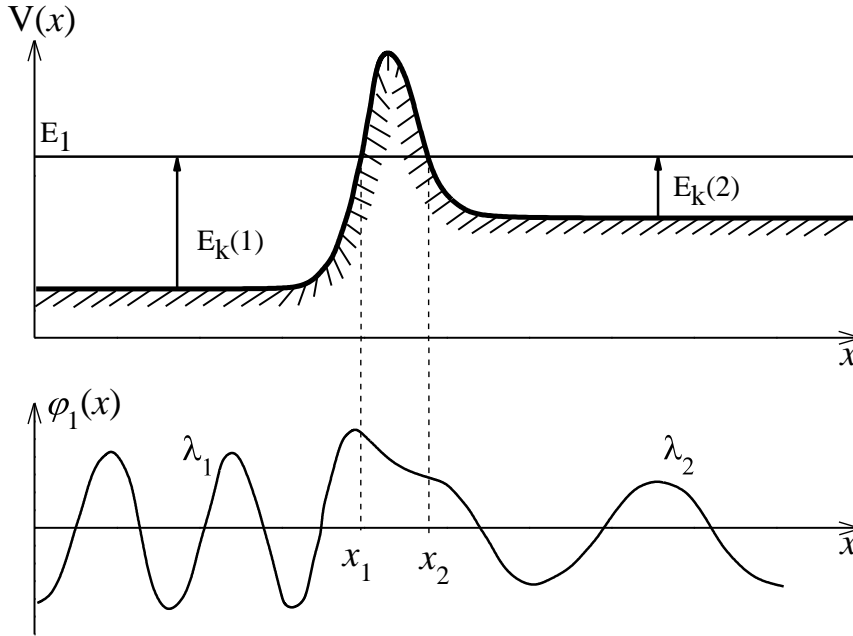


Рис. 10

или в область правее  $x_2$ , не может проникать через потенциальный барьер из одной области в другую.

Волновая функция для микрочастицы с энергией  $E_1$  в данном случае имеет вид  $\varphi_1(x)$ , изображенный на рис. 10. Слева и справа от барьера она осциллирует с длинами волн, соответствующими кинетическим энергиям  $E_k(1)$  и  $E_k(2)$  в этих областях пространства. В

области между  $x_1$  и  $x_2$  она обращена выпуклостью к оси  $x$ . Потенциальный барьер не разделяет пространство для микрочастицы на разрешенную и неразрешенную области. Микрочастица всегда может проникнуть сквозь барьер любой конечной высоты и ширины из одной области в другую.

## 6 ПРИНЦИП НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ ГЕЙЗЕНБЕРГА

Любое стационарное состояние квантовой частицы характеризуется амплитудами вероятности,  $|\varphi\rangle = \varphi(x)|x\rangle$  и  $|\Psi\rangle = \Psi(p)|p\rangle$ . На рис. 11 приведены примерные зависимости плотности вероятности обнаружения частицы в координате  $x$  и плотности вероятности обнаружения у частицы импульса  $p$  для трех разных состояний.

В первом состоянии положение частицы  $x_0$  является определенным, зато полностью не определено значение её импульса. Во втором состоянии определенным является импульс  $p_0$  частицы, но ее равновероятно встретить в любой точке пространства. В третьем состоянии и в импульсе, и в положении частицы есть неопределенность.

Как известно, волновая функция частицы изменяется со временем двумя способами. Во-первых, в случае упругого взаимодействия с внешним потенциалом происходят изменения согласно временному уравнению Шредингера (34). Во-вторых, если производить измерения какой-либо характеристики частицы, волновая функция будет изменяться дискретно, по вероятностным законам. Вто-

рой способ изменения часто называют редукцией или стягиванием волновой функции. Именно редукция и является одним из специфических свойств микросистем, обеспечивающим микрочастицам корпускулярное свойство дискретности.

Так как волновая функция частицы изменяется со временем, то представляет интерес не только соотношение между неопределенностями положения частицы и ее импульса для какого-то момента времени, но и соотношение между изменениями этих неопределенностей.

Количественную связь между неопределенностями импульса и положения частицы дает принцип неопределенности Гейзенберга, являющийся обобщением анализа большой совокупности стационарных состояний и разнообразных методов измерения физических характеристик микрочастиц.

Он утверждает, что нельзя приготовить состояние микросистемы, в котором неопределенность положения частицы  $\Delta x$  и неопределенность  $\Delta p_x$  значения ее импульса вдоль оси  $x$  имели бы одновременно значения точнее, чем это следует из соотношения

$$\Delta x \Delta p_x = h. \quad (56)$$

Здесь  $\Delta x$  – область пространства, в которой вероятность встретить частицу близка к единице;  $\Delta p_x$  – такой интервал вблизи среднего значения импульса частицы  $p_0$ , в котором вероятность обнаружить частицу с импульсом  $p_0 \pm \Delta p_x$  близка к единице.

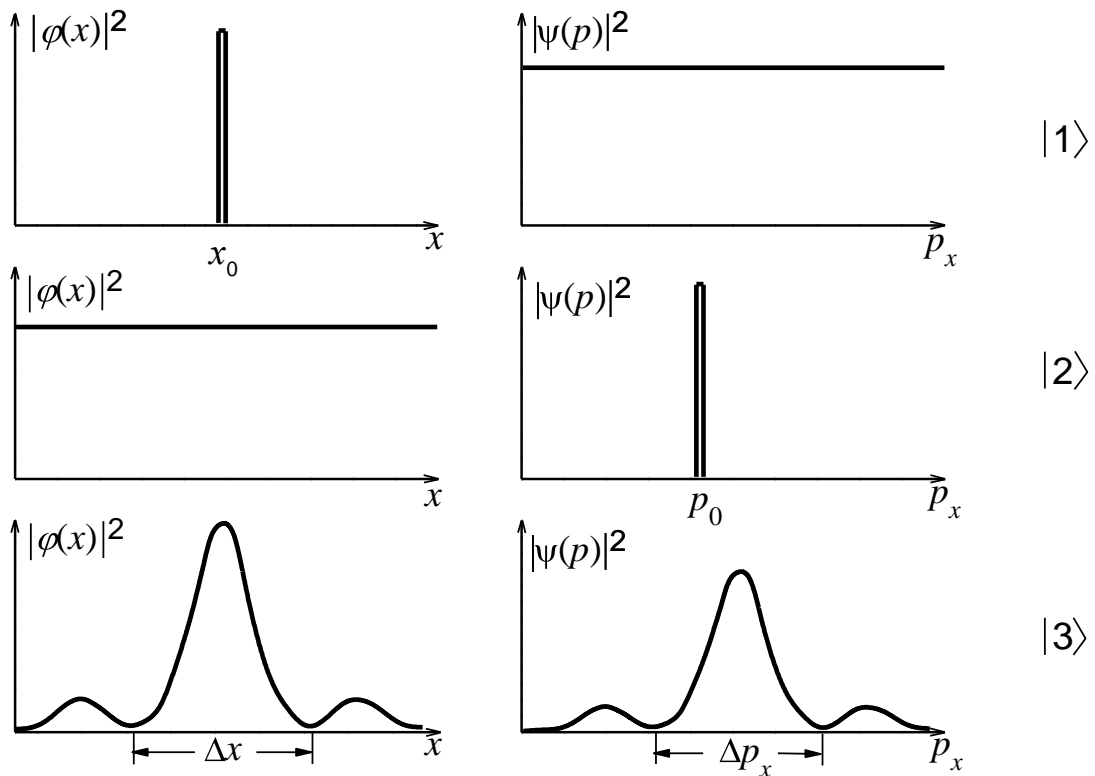


Рис. 11

Итак, каким бы сложным, непонятным и необычным ни было взаимодействие частицы с внешними объектами, всегда можно уверенно утверждать, не вникая в детальный механизм взаимодействия, что в итоге для конечного состояния частицы верно соотношение (56). Это свойство квантовых состояний мож-

но интерпретировать с одной стороны, волновым характером используемых для характеристики состояний амплитуд вероятности, а с другой – тем, что при приготовлении реальных состояний квантовой частицы всегда происходит увеличение неопределенности одной из ее характеристик при уменьшении неопределенности другой.

Поясним первое утверждение. Пусть длина цуга волн, описывающего локализованное состояние частицы, равна  $\Delta x$ . Так как на концах цуга волны спадают, то количество волн на длине  $\Delta x$  известно с точностью порядка 1. Следовательно, число волн на отрезке  $\Delta x$  будет

$$\frac{\Delta x}{\lambda} \pm 1 = \left( \frac{2\pi}{\lambda} \frac{\Delta x}{2\pi} \pm \frac{2\pi}{\Delta x} \frac{\Delta x}{2\pi} \right) = \left( k \pm \frac{2\pi}{\Delta x} \right) \frac{\Delta x}{2\pi}, \quad (57)$$

т. е. неопределенность в волновом числе

$$\Delta k = 2\pi / \Delta x. \quad (58)$$

Квантовомеханическое толкование импульса через волновое число  $p = \hbar k$  приводит к тому, что ( см. (58))  $\Delta p \cdot \Delta x = h$ .

Это свойство присуще волнам любой природы и отражает тот факт, что у волнового цуга ограниченной протяженности в пространстве нет определенного значения длины волны.

Поясним утверждение, что соотношение (56) распространяется на все состояния квантовых частиц и является полуколичественной характеристикой изменений неопределенностей положения и импульса частицы при переходе ее из одного состояния в другое. Для этого рассмотрим два способа приготовления состояния микрочастицы с определенным положением.

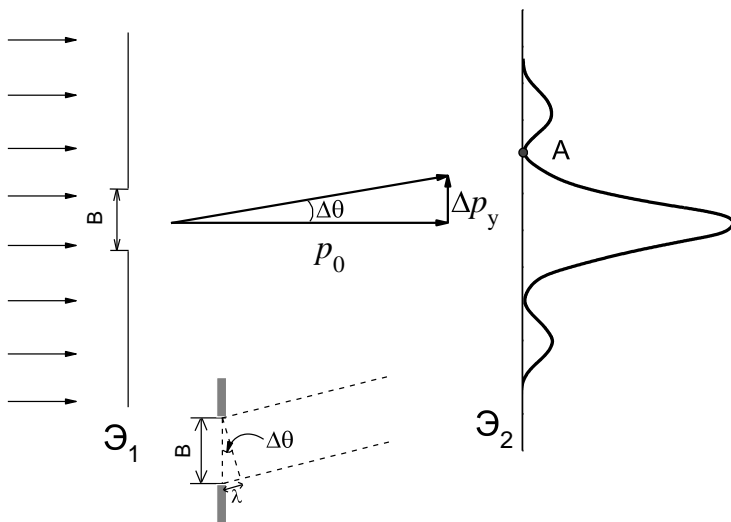


Рис. 12

Пусть, например, частица с определенным импульсом  $p_x$  рассеяла фотон с длиной волны  $\lambda$ . До рассеяния фотона у частицы был определенный импульс и полностью неопределенное положение вдоль оси  $x$  (см. рис. 11). После рассеяния фотона положение частицы локализовалось в области длиной порядка  $\Delta x = \lambda$ , но при рассеянии фотон передал частице импульс порядка своего собственного

$p_\phi = h/\lambda$ . После этого частица будет иметь импульс  $p_x \pm p_\phi$ . Так как  $p_\phi = \Delta p$ , то  $\Delta p = h/\lambda$ , и, соответственно,  $\Delta p \cdot \Delta x = h$ , что согласуется с (56).

Другой пример измерения положения частицы изображен на рис. 12.

Пусть сквозь щель шириной  $B$  в экране ( $\mathcal{E}_1$ ) проходят частицы, движущиеся с одинаковой энергией перпендикулярно к экрану. Для каждой частицы горизонтальная составляющая импульса равна  $p_0$ , а вертикальная  $p_y$  равна нулю.

Щель в экране позволяет установить вертикальное положение частицы за щелью с точностью ширины щели. Но за щелью частица уже не всегда движется горизонтально. Примерное распределение вероятности попадания частиц, на удаленный экран показано также на рис. 12 на экране  $\mathcal{E}_2$ .

Итак, до экрана  $\mathcal{E}_1$  известен вертикальный импульс частицы  $p_y = 0$ , но полностью неопределенной является ее вертикальная координата. После щели вертикальное положение частицы известно с точностью  $\pm B$ , но вертикальный импульс уже не ноль. Так как большинство частиц за щелью летит внутри угла раствора  $\Delta\theta$ , соответствующего направлению на первый минимум интерференционной картины на экране  $\mathcal{E}_2$ , то неопределенность импульса этих частиц находится в интервале

$$p_y = p_0 \Delta\theta. \quad (59)$$

Известно, что первый минимум появляется при условии, что амплитуда вероятности прохождения частицы от верхней точки щели до точки А отличается от амплитуды вероятности прохождения частицы в эту же точку от нижней точки щели на одну длину волны. Отсюда следует, что

$$\lambda = B \Delta\theta. \quad (60)$$

Так как импульс налетающей частицы

$$p_0 = \frac{h}{\lambda}, \quad (61)$$

то получаем

$$B \Delta p_y = h, \quad (62)$$

что согласуется с (56).

Итак, чем меньше размеры щели, тем точнее определяется положение частицы за щелью и тем большая неопределенность возникает в значении вертикального импульса частицы за щелью.

Таким образом, соотношение неопределенностей (56) отражает свойство природы, заключающееся в том, что в результате определения положения частицы внешнее воздействие на частицу внесет неопределенность в ее импульс. Экспериментальное же устройство, используемое для последующего измерения или уточнения импульса частицы, вызовет соответствующую делокализацию частицы в пространстве.

Информация о любом состоянии микрочастиц, заключенная в соотношении (56), может быть использована для оценки некоторых других физических характеристик частицы, например, для оценки наименьшего значения энергии, которой обладает частица в потенциальной яме типа, изображенного на рис. 8.

Так как импульс частицы может иметь значение  $+p$  и  $-p$ , где  $p$  – некоторое среднее значение импульса в основном состоянии частицы, то неопределенность импульса  $\Delta p = 2p$ . Если частица локализована в области длиной  $L$ , где  $L$  – длина потенциальной ямы вблизи ее дна, то в соответствии с (56)

$$2pL = h. \quad (63)$$

Следовательно, средняя кинетическая энергия частицы в основном состоянии будет

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2m} \frac{h^2}{4L^2},$$

что совпадает с (54).

Как следует из вышеизложенного, понятие определенной энергии существует для стационарных состояний, волновая функция которых зависит от времени в соответствии с формулой

$$\Phi = \Phi_0 e^{-i\omega t}, \quad (64)$$

где  $E = \hbar\omega$ , т. е. представляет бесконечно долго осциллирующую во времени функцию. Следовательно, состояния с определенной энергией должны существовать бесконечно долго.

Если же состояние возникло в момент времени  $T$  и исчезло в момент времени  $T + \Delta T$ , то оно характеризуется функцией

$$\Phi_1 = \sum c_i |E_i\rangle, \quad (65)$$

где  $|c_i|^2$  – вероятность обнаружить систему в интервале времени  $\Delta T$  с энергией  $E_i$ .

Если время жизни состояния  $\Phi_1$  равно  $\Delta T$ , то вблизи некоторого значения средней энергии  $E_0$  существует интервал  $\Delta E$ , вероятность обнаружения энергии системы в котором близка к единице.

Между этим, интервалом  $\Delta E$  и интервалом времени  $\Delta T$  существует связь, справедливая для любых состояний, независимо от способа их приготовления

$$\Delta E \Delta T = \hbar. \quad (66)$$

Похожее свойство присуще волнам любого сорта, существующим ограниченное время. Например, в прошедшем мимо нас цуге колебаний конечной длины за время  $\Delta T$  мы насчитали  $N$  колебаний и должны допустить неточность, равную одному колебанию. Следовательно, найденная частота волн

$$\nu = \frac{N \pm 1}{\Delta T}. \quad (67)$$

Соотношение между неточностью найденной частоты и возможным временем наблюдения за волной имеет вид:

$$\Delta\nu \cdot \Delta T = 1. \quad (68)$$

Квантово-механическое толкование энергии через частоту осцилляции волновой функции во времени  $E = \hbar \cdot 2\pi\nu = \hbar\nu$  позволяет из (68) получить (66).

Если, например, атом в возбужденном состоянии проводит время порядка  $\Delta T$ , то можно утверждать, что при переходе атома из возбужденного состояния ( $E_1$ ) в основное ( $E_0$ ) будут излучаться фотоны с энергиями в интервале  $\Delta E = \hbar/\Delta T$  вблизи значения энергии  $E_1$ .

## 7 ОБЩИЕ МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ

Мы разместили этот раздел на последних страницах, чтобы иметь возможность дать рекомендации студентам, уже ознакомившимся с основными идеями, терминологией, объемом и размещением материала. Поскольку в данной работе представлен один из возможных вариантов изложения основ квантовой механики, опирающийся на понятие амплитуды вероятности, предварительно следует повторить раздел «Амплитуда вероятности» по рекомендуемой литературе [1] или [3]. Кроме того, необходимо ознакомиться с уравнениями диффузионного типа, которые изложены в учебнике [2], т.1, раздел «Физическая кинетика».

Первый совет – не ограничивайтесь единственным прочтением, даже если покажется, что все изложенное вполне понятно. Нужно поработать с этим материалом еще, по крайней мере, два раза. При первом повторении обратите особое внимание на требования к описанию неопределенных, недетерминированных и базисных состояний. Уясните, что приведенный, «вывод» уравнения Шредингера не является в строгом смысле доказательством этого уравнения, а служит лишь иллюстрацией одной из возможных качественных схем для понимания его происхождения. Обратите внимание на графические методы решения уравнения Шредингера, на конкретные результаты их применения в различных случаях. Этот материал очень важен, так как является качественной основой для объяснения свойств более сложных микрообъектов.

При втором повторении в целях глубокого усвоения материала используйте приведенные ниже контрольные вопросы, рассмотренные на практических занятиях примеры и задачи, а также рекомендованные учебники.

Интересующимся историей становления квантовой механики посоветуем обратиться к учебнику [4].

### 7.1 Контрольные вопросы

- 1 Что такое неопределенное состояние? Недетерминированное состояние?
- 2 Что такое ортогональный нормированный набор базисных состояний?
- 3 Какой смысл имеют величины  $C_k$ ,  $H_{k,k}$ ,  $H_{k,m}$ ?
- 4 Что характеризует оператор эволюции?
- 5 Какие состояния системы называются стационарными?
- 6 Как зависит от времени амплитуда вероятности для стационарных состояний?
- 7 Какое отличие между  $C_k(t)$  в (28) и  $C(x,t)$  в (34)?
- 8 Какую роль играет соотношение неопределенностей при получении уравнения Шредингера?
- 9 Что такое потенциальная яма? Потенциальный барьер?
- 10 В чем заключается туннельный эффект?

## 7.2 Рекомендуемая литература

- 1 Атомная физика. В 3 ч. Ч. 1 : учебно-методическое пособие / В.Ф. Демехин [и др.]. – Ростов н/Д : РГУПС. 2016. – 28 с.
- 2 Савельев, И.В. Курс общей физики. В 3 т. Т. 1 / И.В. Савельев. – СПб. : Лань, 2016. – 432 с.
- 3 Фейнман, Р. Фейнмановские лекции по физике / Р. Фейнман, Р. Лейтон, М. Сэндс. – М. : Либроком, 2015–2016.
- 4 Кудрявцев, П.С. Курс истории физики / П.С. Кудрявцев. – М. : Просвещение, 1982. – 158 с.

*Учебное издание*

**Демехин Владимир Филиппович**  
**Лагутин Борис Михайлович**  
**Демехина Нелли Владимировна**  
**Явна Виктор Анатольевич**

**АТОМНАЯ ФИЗИКА**

Часть 2

Печатается в авторской редакции  
Технический редактор Т.И. Исаева

Подписано в печать 21.02.17. Формат 60×84/16.  
Бумага газетная. Ризография. Усл. печ. л. 1,86.  
Тираж      экз. Изд. № 5011. Заказ      .

Редакционно-издательский центр ФГБОУ ВО РГУПС.

---

Адрес университета: 344038, г. Ростов н/Д, пл. Ростовского Стрелкового Полка  
Народного Ополчения, 2