

1.1. Волна де Бройля

Из предыдущих разделов физики нам известно, что такие процессы природы, как тепловое и рентгеновское излучения, фотоэффект и др., хорошо объясняются на основе использования корпускулярных представлений. С другой стороны, интерференция, дифракция, поляризация света объясняются на основе волновых представлений, согласно которым свет есть электромагнитные волны. Таким образом, свет, в широком понимании этого слова, представляет своеобразное сочетание волновых и корпускулярных свойств материи. В одних условиях эта материя наиболее четко проявляет волновые свойства, в других – корпускулярные. Одним из критериев применимости того или иного подхода является величина поперечного сечения цуга волн: если поперечное сечение цуга волны сравнимо с размерами частиц вещества, то свет, электромагнитная волна проявляют корпускулярные свойства и электромагнитное излучение можно рассматривать как поток световых частиц, если же поперечное сечение цуга волн значительно больше размера частиц, то свет следует рассматривать как поток электромагнитной волны.

Таким образом, свет как материя обладает двойственной природой.

Пусть на границу раздела двух сред падает плоская электромагнитная волна.

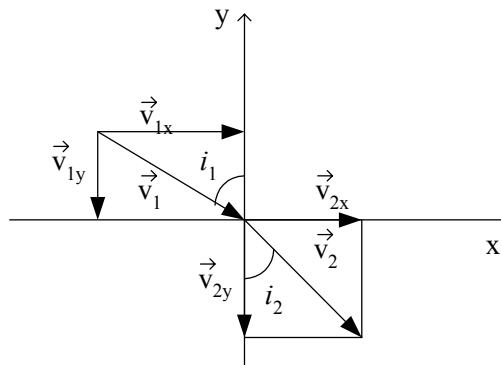


Рис. 1.1.1. Изменение скорости частицы у поверхности раздела сред без учета преобразования полей

Из рис. 1.1.1 следует, что $v_{1x} = v_{2x}$ или

$$v_1 \sin i_1 = v_2 \sin i_2; \quad n_1 = \frac{c}{v_1}, n_2 = \frac{c}{v_2}; \quad \frac{\sin i_1}{\sin i_2} = \frac{v_1}{v_2} = \frac{n_2}{n_1} = \frac{1}{n},$$

где v – фазовая скорость, c – скорость света в вакууме, $n = \frac{v_1}{v_2} = \frac{n_2}{n_1}$ – абсо-

лютный показатель преломления, i_1, i_2 – углы падения и преломления.

Применив корпускулярный подход, мы получили закон, обратный закону преломления. Таким образом, хотя для оптических явлений корпускулярный подход применим, но он дает неверный результат. Причина несоответствия корпускулярной теории опыту состоит в том, что для описания этого процесса необходим иной подход, при котором учитываются взаимодействия множества световых частиц с атомами вещества. Математической основой описания такого процесса является кинетическое уравнение переноса.

В 1923 г. французский ученый де Бройль высказал предположение, что двойственная природа материи должна проявляться не только у электромагнитного излучения. Он предположил, что электроны при определенных условиях должны проявлять волновые свойства. Он писал: "В оптике в течение столетия слишком пренебрегали корпускулярным способом рассмотрения явлений по сравнению с волновым. Не делалось ли в теории материи обратной ошибки? Не думали ли мы слишком много о картине частиц и не пренебрегали ли чрезмерно картиной волн?" В 1929 г за эту работу ему была присуждена Нобелевская премия.

Де Бройлю было 30 лет, когда он высказал свою гипотезу о волновых свойствах материи и вывел формулу, с помощью которой можно вычислить длину волны, связанную с движущимся электроном. К мысли о том, что электрон должен обладать волновыми свойствами, де Бройля привели следующие факты и соображения. В природе существует аналогия между геометрической оптикой и механикой. Основные законы этих двух разделов физики можно сформулировать в тождественно математической форме. Это значит, что вместо того чтобы рассматривать движение заряженной частицы в электрическом поле с потенциалом $\varphi(\vec{r})$, можно рассматривать распространение потока частиц в пространстве с абсолютным показателем $n(\vec{r})$.

Заметим, что рассматриваемая аналогия в настоящее время охватывает все разделы физики и в ряде случаев бывает очень полезной. Покажем это на конкретном примере.

Допустим, имеется две контактирующие между собой среды. Потенциал электрического поля в верхней среде φ_1 , а потенциал в ниж-

ней среде φ_2 . На границе раздела происходит постепенное изменение потенциала. Тогда напряженность электрического поля в пограничном слое можно представить в виде (см. рис. 1.1.2):

$$\vec{E} = -\frac{d\varphi}{dy} \vec{j} = E_y \vec{j}.$$

Если $\varphi_1 > \varphi_2$,

$$\frac{d\varphi}{dy} < 0, \quad \vec{E} \uparrow \uparrow \vec{j},$$

и в пределах пограничного слоя на электрон будет действовать сила

$$\vec{F}_y = e\vec{E}, \quad e < 0,$$

направленная вниз, а в направлении координатной оси OX сила действовать не будет, так как $E_x = 0$. Следовательно,

$$F_{1x} = F_{2x} = 0, \quad v_{1x} = v_{2x}; \quad \vec{F}_y \uparrow \downarrow \vec{j}. \quad (1.1.1)$$

$$\frac{\sin i_1}{\sin i_2} = \frac{v_2}{v_1}.$$

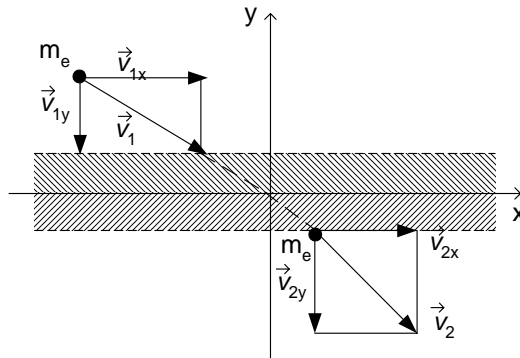


Рис. 1.1.2. Изменение скорости частицы у поверхности раздела сред с учетом преобразования полей

Электрон, проникая в пространство с потенциалом φ_1 , приобретает кинетическую энергию

$$k_1 = \frac{m_e v_1^2}{2} = e\Delta\varphi_1$$

Тогда в пространстве с потенциалом φ_2 его кинетическая энергия будет

$$k_2 = \frac{m_e v_2^2}{2} = e\Delta\varphi_2.$$

Значит,

$$\frac{v_2}{v_1} = \left(\frac{\Delta\varphi_2}{\Delta\varphi_1} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (1.1.2)$$

Подставляя полученное выражение (1.1.2) в (1.1.1), имеем:

$$\frac{\sin i_1}{\sin i_2} = \left(\frac{\Delta\varphi_2}{\Delta\varphi_1} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (1.1.3)$$

Формула (1.1.3) является математической записью закона преломления в электронной оптике.

Закон преломления в геометрической оптике формулируется в виде

$$n_{21} = \frac{n_2}{n_1} = \frac{\sin i_1}{\sin i_2}. \quad (1.1.4)$$

Из сравнения выражений (1.1.3) и (1.1.4) можно получить относительный показатель преломления в электронной оптике:

$$n_{21} = \left(\frac{\Delta\varphi_2}{\Delta\varphi_1} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (1.1.5)$$

В случае электромагнитных волн плоская электромагнитная волна представляет собой пучок параллельных лучей, для которых волновой фронт – плоскость, перпендикулярная направлению распространения лучей, а волновая поверхность – система параллельных поверхностей с колебаниями векторов \vec{E} и \vec{H} в одной и той же фазе

$$\vec{E} = E_0 \cos(\omega t - kx) \cdot \vec{j}, \quad \vec{H} = H_0 \cos(\omega t - kx) \cdot \vec{k}, \quad k = \frac{2\pi}{\lambda}, \quad \vec{k} = \frac{\vec{r}}{r}.$$

Однако, если принять корпускулярную точку зрения, то плоскую электромагнитную волну можно рассматривать как поток световых частиц, перемещающихся в пространстве параллельно (рис. 1.1.3) или даже связать ее с отдельно движущимся фотоном.

Если в пространстве существует поток свободных, не взаимодействующих между собой электронов (на эти электроны не действуют внешние силы), то в таком потоке электроны должны перемещаться параллельно. Эта картина верна, если пользоваться корпускулярными представлениями. Но если воспользоваться волновыми представлениями, т.е. применить понятие волны материи, то с таким потоком частиц можно связать некий волновой процесс, и описание движения электронов с волновой точки зрения должно быть аналогично описанию плоской электромагнитной волны. Следовательно, такой волновой процесс также можно изобразить в виде плоской волны. Поэтому де Бройль предположил, что между волновыми и корпускулярными

характеристиками электрона должна существовать точно такая же взаимосвязь, как и между соответствующими характеристиками фотона. И, кроме того, де Бройль предположил, что корпускулярное описание движения свободного электрона должно быть подобно корпускулярному описанию фотона, волновое описание свободного электрона должно быть подобно волновому описанию потока фотонов в электромагнитной волне (рис. 1.1.3).

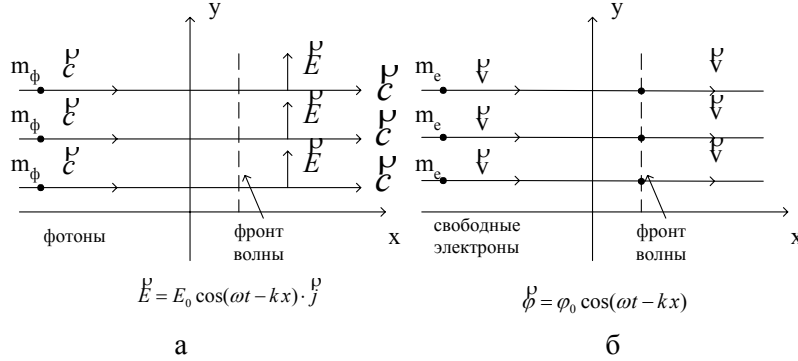


Рис. 1.1.3. Модель плоской волны для фотонов (а) и для электронов (б)

По определению импульс фотона и энергия фотона соответственно равны

$$p_\phi = m_\phi c, \quad \varepsilon = m_\phi c^2 = p_\phi c, \quad \varepsilon = h\nu, \quad \nu = \frac{c}{\lambda}.$$

Значит,

$$p_\phi = \frac{\varepsilon}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}; \quad p_\phi = \frac{h}{\lambda}, \quad (1.1.6)$$

где λ – длина электромагнитной волны, h – постоянная Планка, p_ϕ – импульс фотона. Таким образом, уравнение (1.1.6) связывает между собой как корпускулярные, так и волновые характеристики света воедино, а коэффициентом связи является постоянная Планка.

Де Бройль предположил, что уравнение (1.1.6) можно применять не только для фотонов, но и для электронов. А так как импульс электрона $p_e = p = m_e v$, то длина волны некоторого волнового процесса, связанного с движущимся электроном, будет определяться из уравнения

$$p = \frac{h}{\lambda} = m_e v.$$

Отсюда

$$\lambda = \frac{h}{m_e v}.$$

И если

$$K = \frac{m_e v^2}{2} = eU \leq 10 \text{ кэВ},$$

то масса электрона $m_e = m_0$, т.е. практически не отличается от массы покоя. Тогда в соответствии с законом сохранения энергии можем записать:

$$eU = \frac{m_e v^2}{2}; \quad v = \left(\frac{2eU}{m_e} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (1.1.7)$$

После подстановки найденного выражения для скорости имеем

$$\lambda = \frac{h}{m \left(\frac{2eU}{m_e} \right)^{\frac{1}{2}}}$$

или

$$\lambda = \frac{12,3 \cdot 10^{-10}}{U^{\frac{1}{2}}} \text{ м} = \frac{12,3}{U^{\frac{1}{2}}} \text{ \AA}, [U]=\text{В}.$$

Пусть $U = 100 \text{ В}$. Тогда $\lambda = 0,12 \text{ нм}$. Если же $U = 10000 \text{ В}$, то $\lambda = 0,012 \text{ нм}$.

Таким образом, длина волны свободного электрона, двигающегося со скоростью v , соответствует длине волны рентгеновского излучения. На это обстоятельство мы обратим внимание в дальнейшем. Такое совпадение, разумеется, носит случайный характер.

1.2. Опыт Дэвиссона - Джермера

Любая гипотеза, как бы она ни была привлекательна и правдоподобна, остается гипотезой до тех пор, пока она не подтвердится опытом. Только прямые опыты, в которых отчетливо проявлялись бы волновые свойства частиц, могли бы подтвердить правильность идеи де Бройля.

В 1922 г. по заказу американской фирмы "Белл-телефон" Клинтон Джозеф Дэвиссон (1881–1958) и его сотрудник Кансмен изучали отражение электронов от поверхности металла и при этом обнаружили какие-то аномалии. В 1925 г. Дэвиссон, находясь в Европе, показал

свои графики Макс Борну, Джеймсу Франку (аспиранту Борна) в Геттингене и Дугласу Хартри в Оксфорде.

Все они признали, что аномалии на графиках свидетельствуют о проявлении волновых свойств электронов, т.е. волн де Бройля, хотя и не убедили в этом Дэвиссона. Вскоре после возвращения в Америку в экспериментальной установке Дэвиссона во время работы случилась авария: треснула вакуумная трубка, и нагретый в это время поликристаллический Ni под действием кислорода воздуха окислился. После восстановления установки и прокаливания образца в вакууме исследования совместно с Лестером Альбертом Джермером (1896–1971) были продолжены. Вскоре выяснилось, что спектр отраженных электронов имеет отчетливо выраженные интерференционные максимумы. В результате к концу 1927 г. они убедились в реальности существования волн материи. Но еще в 1925 г. студент М. Борна Вальтер Эльзассер, получив задание разобраться с этим явлением, предположил, что аномалии на графиках Дэвиссона объясняются электронными волнами де Бройля. Он послал в журнал краткую заметку, в которой объяснил результаты опытов Дэвиссона и Кансмана дифракцией волн материи. Однако на эту заметку тогда никто не обратил внимание.

Схема экспериментальной установки Дэвиссона представлена на рис. 1.2.1.

Что же произошло в установке Дэвиссона после прокаливания? В результате прокаливания и дальнейшего остывания на поверхности поликристаллического Ni возникли отдельные монокристаллы. При попадании электронов на монокристалл Ni число электронов в направлении угла скольжения меняется в зависимости от энергии электронов. Оказалось, что существуют такие значения энергии, при которых отражение электронов максимально, и существуют такие значения энергии, при которых число отраженных электронов минимально. В результате на экспериментальном графике наблюдаются чередующиеся максимумы и минимумы интерференции электронных волн.

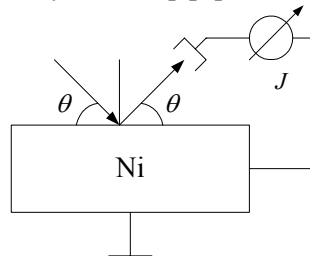


Рис. 1.2.1. Схема установки Дэвиссона

Если теперь при заданном значении угла скольжения θ и полярного угла менять энергию первичных электронов, то график должен иметь вид, изображенный на рис.2.2.2.

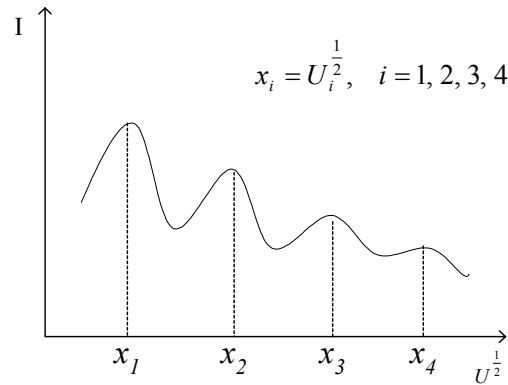


Рис. 1.2.2. Интерференция картины электронов

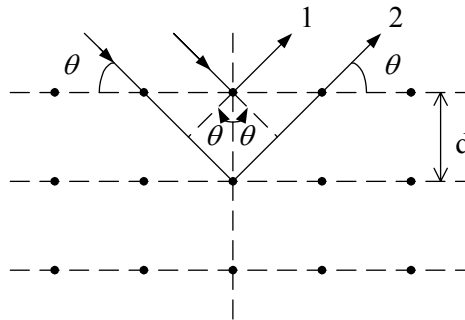


Рис. 1.2.3. Модель интерференции волн в кристалле

Известно, что монокристалл Ni можно представить в виде системы кристаллографических плоскостей. Если принять, что отражение волн материи происходит от кристаллографических плоскостей, то в результате интерференции волн максимум отраженной волны будет возникать в случае разности хода лучей, кратной длине волны (рис. 1.2.3). Из рис. 1.2.3 следует, что разность хода у интерферирующих лучей 1 и 2

$$\Delta = 2d \sin \theta .$$

Отсюда

$$2d \sin \theta = m\lambda, \quad m = 1, 2, 3, \dots, \quad (1.2.1)$$

где d – межплоскостное расстояние, θ – угол скольжения. Если считать, что гипотеза де Бройля правильна, то длина волны

$$\lambda = \frac{12,3 \cdot 10^{-10}}{\sqrt{U}} \text{ м},$$

и после подстановки в (1.2.1) получаем:

$$2d \sin \theta = m \frac{12,3 \cdot 10^{-10}}{\sqrt{U}}; \quad \sqrt{U} = m c_1, \quad c_1 = \frac{12,3 \cdot 10^{-10}}{2d \sin \theta};$$

$$\left(\frac{U_2}{U_1}\right)^{\frac{1}{2}} = 2; \quad \left(\frac{U_3}{U_1}\right)^{\frac{1}{2}} = 3; \quad \left(\frac{U_4}{U_1}\right)^{\frac{1}{2}} = 4.$$

Таким образом, возникновение максимумов на экспериментальных графиках следует рассматривать как результат интерференции волн неизвестной пока природы, которые связаны с движущимся электроном в пространстве. Значит, движение электронов в пределах кристаллической решетки можно рассматривать как волновой процесс.

Наличие экспериментально наблюдаемых максимумов и минимумов и их правдоподобное объяснение является доказательством правильности гипотезы де Бройля о наличии в природе волн материи. Как оказалось впоследствии, волновыми свойствами обладают не только электроны, но и любые микрочастицы.

1.3. Волновая функция

Итак, несомненно, поток электронов обладает и волновыми, и корпускулярными свойствами. Это значит, что движущемуся электрону соответствует какой-то волновой процесс неизвестной пока природы. Де Бройль также не понимал физическую природу этого волнового процесса и поэтому предложил описать его с помощью функции, которую он назвал волновой функцией, т.е. функцией, которая описывает движение частиц с волновой точки зрения. Но при этом он считал, что при таком описании должна сохраниться аналогия с описанием волнового процесса в оптике.

Мы знаем, что движение фотонов в виде пучка параллельных лучей описывается плоской электромагнитной волной. Следовательно, и движение свободных электронов, перемещающихся в пространстве параллельно и прямолинейно, также должно описываться в виде плоской волны, образованной волновой функцией.

Введение волновой функции, ее конкретный вид проще всего выяснить на примере использования знакомых нам явлений.

Уравнение плоской электромагнитной волны имеет вид

$$E = E_0 \cos(\omega t - k x), \quad H = H_0 \cos(\omega t - k x).$$

Запишем теперь это же уравнение так, чтобы в него вошли как корпускулярные, так и волновые характеристики материи. Для этого перейдем от ω и k , характеризующих процесс с волновой точки зрения, к энергии кванта ϵ и импульсу кванта p , характеризующим тот же процесс с корпускулярной точки зрения:

$$\omega = 2\pi\nu = \frac{2\pi}{h}h\nu = \frac{2\pi}{h}\epsilon = \frac{\epsilon}{\eta}; \quad \eta = \frac{h}{2\pi};$$

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi}{h} \frac{h}{\lambda} = \frac{2\pi}{h} p = \frac{p}{\eta};$$

здесь p – импульс фотона. Тогда, заменив ω и k в уравнении плоской электромагнитной на ϵ и p , получим:

$$E = E_0 \cos\left(\frac{1}{\eta}(\epsilon t - px)\right), \quad H = H_0 \cos\left(\frac{1}{\eta}(\epsilon t - px)\right).$$

Аналогичное выражение получается, если плоскую волну выразить не через косинус, а через синус. Поэтому в общем случае эти две тригонометрические функции можно объединить и записать уравнение плоской электромагнитной волны в более общем виде:

$$E = E_0 e^{-\frac{i}{\eta}(\epsilon t - px)}, \quad H = H_0 e^{-\frac{i}{\eta}(\epsilon t - px)}.$$

При такой форме записи мы видим, что в уравнении плоской электромагнитной волны отображаются и волновые, и корпускулярные свойства материи. Волновые свойства здесь проявляются в том, что эти уравнения записаны в виде волны, а корпускулярные свойства проявляются в том, что параметрами электромагнитной волны являются энергия фотона ϵ и импульс p фотона, причем под ϵ здесь понимается полная энергия фотона или других микрочастиц, если подобные рассуждения проводить для них. Если же движение фотона происходит в произвольном направлении, то в общем случае уравнение плоской электромагнитной волны с учетом корпускулярных свойств материи будет

$$E = E_0 e^{-\frac{i}{\eta}(\epsilon t - \beta \rho)}, \quad H = H_0 e^{-\frac{i}{\eta}(\epsilon t - \beta \rho)},$$

$$E_0 = \text{const}, H_0 = \text{const}, \rho = x i + y j + z k.$$

Де Бройль в своих физических рассуждениях исходил из предвзятой, но очень плодотворной идеи. Он считал, что законы природы и уравнения, при помощи которых описываются эти законы как с волновой, так и с корпускулярной точек зрения, во всех физических явлениях должны быть едины и поэтому должны иметь тождественный

вид. Поэтому де Бройль предложил воспользоваться аналогичным выражением для описания волновых свойств электрона, только вместо векторов \vec{E} и \vec{H} , имеющих ясный физический смысл в случае светового потока, ввести некоторую волновую функцию ψ , записав с помощью этой функции уравнение плоской волны:

$$\psi = \psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(\varepsilon t - px)}, \quad (1.3.1)$$

где в случае плоской волны $\psi_0 = \text{const}$.

Не надо думать, что волновая функция, которая здесь была введена по аналогии, является характеристикой только электрона. Нет! При помощи этой функции можно также описать распространение света в пространстве как с волновой, так и с корпускулярной точек зрения. Но только физический смысл волны де Бройля будет отличаться от физического смысла электромагнитной волны. Введение волновой функции ψ есть новая математическая формулировка одного из законов природы, который проявляет свое действие в микромире.

На приведенном примере мы вновь убеждаемся в том, что математическая формулировка основных законов природы не выводится, а постулируется, о них догадываются. Поскольку введенная волновая функция есть закон природы, отображающий объективную реальность, и поскольку ее аналитическое выражение получено путем использования аналогии, т.е. по существу по догадке, то все рассуждения, связанные с постулированием вида волновой функции, являются яркой иллюстрацией того, что, как правило, фундаментальные законы природы являются обобщением результатов эксперимента в виде конкретных аналитических формул.

Итак, на примере волновой функции ψ мы проследили все этапы открытия волновой функции для свободного электрона, мы как бы проанатомировали само открытие волновой функции, при помощи которой можно описать движение электрона с волновой точки зрения.

Де Бройль считал, что уравнение (1.3.1) описывает движение свободного электрона с полной энергией $\varepsilon = m_e c^2$ и импульсом $p = m_e v$. Предположим, что в пространстве существуют такие точки и такие моменты времени, для которых фаза колебаний всегда постоянная. Тогда для свободного электрона, у которого $\varepsilon = \text{const}$, $p = \text{const}$,

$$\varepsilon t - px = \text{const}, \quad \varepsilon - p \frac{dx}{dt} = 0; \quad v_{\text{фаз}} = \frac{dx}{dt} = \frac{\varepsilon}{p} = \frac{c^2}{v} > c.$$

Следовательно, фазовая скорость волны де Бройля не совпадает со скоростью движения частицы, поскольку она больше скорости света в вакууме. Поэтому фазовая скорость определяет всего лишь скорость

перемещения фазы в пространстве некоторого колебательного процесса, описывающего движение электрона с волновой точки зрения и не больше. Это указывает на то, что волновая функция не может непосредственно описать движение электронов в пространстве, она имеет иной более сложный физический смысл.

Итак, оказывается, что фазовая скорость свободного электрона больше скорости света в вакууме. С этой скоростью частицы в пространстве перемещаться не могут. Если же ввести в рассмотрение такие гипотетические частицы, как тахионы, то окажется, что они в пространстве могут перемещаться со скоростью больше скорости света в вакууме, но это уже будут не реально существующие в природе частицы. Нечто подобное имеет место в оптике, когда при рассмотрении распространения света в анизотропных средах мы вынуждены применять такие понятия, как фазовая и лучевая скорости, имеющих разный физический смысл.

Иначе обстоит дело с групповой скоростью волн де Бройля. Известно, что для любого волнового процесса

$$v_{\text{груп}} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d\varepsilon}{dp}.$$

Подставляя сюда $\varepsilon = \varepsilon_0 + \frac{mv^2}{2}$ и $p = mv$, где ε_0 – энергия покоя, m – масса, v – скорость частицы (полагаем $v \ll c$), получим

$$v_{\text{груп}} = v.$$

То есть движению частицы в пространстве отвечает групповая скорость волны, иными словами – скорость перемещения волнового пакета.

1.4. Физический смысл волновой функции

Физический смысл волновой функции раскроем на примере оптического явления, последовательно рассматривая его с волновой и корпускулярной точек зрения.

Допустим, что экран освещается пучком параллельных лучей монохроматического света. Площадь поверхности экрана равна S . Пусть на поверхность экрана за 1 с попадает N квантов.

Из уравнений Максвелла для электромагнитных волн следует, что энергия электромагнитных волн в равной степени определяется величиной электрической и магнитной составляющей волны. Но при энергетическом взаимодействии потока электромагнитной волны с веще-

ством существенную роль играет лишь ее электрическая составляющая. Поэтому уравнение плоской электромагнитной волны будет иметь вид

$$E = E_0 e^{-\frac{i}{n}(\epsilon t - p x)}$$

Известно, что энергетический поток излучения Φ для поверхности S пропорционален E_0^2 , где E_0 – амплитуда колебаний напряженности электрического поля в электромагнитной волне, падающей на поверхность S . Но так как, по определению, поток электромагнитной волны есть мощность электромагнитной энергии (энергии облучения поверхности за 1с), то тот же поток равен числу квантов N , попадающих на поверхность S за 1с. Каждый квант несет энергию $h\nu$, поэтому полная энергия, переносимая N квантами за 1с, будет $N h\nu$. Следовательно,

$$\Phi = a_1 E_0^2 = N \cdot h\nu. \quad (1.4.1)$$

Выделим теперь в пределах поверхности экрана S его элемент площади ΔS_i . На выделенный элемент площади ΔS_i будет падать энергетический поток $\Delta\Phi_i$, он пропорционален E_{0i}^2 и n_i , где E_{0i} – амплитуда колебаний напряженности электрического поля той части электромагнитной волны, которая падает на выделенный элемент площади экрана, n_i – число квантов, которые падают на тот же выделенный элемент площади за 1с. Тогда имеем

$$\Delta\Phi_i = a_i E_{0i}^2 = n_i h\nu. \quad (1.4.2)$$

Разделим (2) на (1):

$$\frac{\Delta\Phi}{\Phi} = \frac{a_i E_{0i}^2}{N h\nu} = \frac{n_i h\nu}{N h\nu} = \frac{n_i}{N}. \quad (1.4.3)$$

Отношение n_i/N есть отношение числа благоприятных случаев, состоящих в попадании n_i квантов за 1с на выделенный элемент площади ΔS_i , к общему числу наблюдаемых случаев, состоящих в том, что на всю поверхность экрана S за 1с попадает N квантов. Как известно из курса высшей математики, это отношение (строго говоря, при $\frac{n_i}{N} \rightarrow 0$) представляет собой вероятность осуществления данного события. Так как $n_i \ll N$, то это отношение обозначим

$$d\omega = \frac{n_i}{N} \ll 1.$$

Тогда с учетом (1.4.3) имеем

$$d\omega = a_2 E_{0i}^2,$$

$$a_2 = \frac{a_1}{N h\nu}.$$

Отсюда видно, что квадрат напряженности электрического поля в электромагнитной волне пропорционален вероятности попадания n_i квантов за 1 с на выделенный участок поверхности Δs_i , т.е. мы пришли к новой физической интерпретации амплитуды напряженности электрического поля электромагнитной волны.

Теперь воспользуемся понятием волновой функции. Вспомним, как мы ввели это понятие. Это понятие нами было введено на основе аналогии, существующей между оптическими и электрическими явлениями, на основе существующей аналогии движения между потоком фотонов в пучке параллельных лучей и потоком свободных электронов. Для фотонов можем записать:

$$E_i = E_{0i} e^{-\frac{i}{\hbar}(\varepsilon t - p x)}, \quad \psi = \psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(\varepsilon t - p x)}.$$

Из сравнения этих двух функций мы можем заключить, что ψ_0 аналогично E_{0i} , ψ_0^2 аналогично E_{0i}^2 . Так как волновую функцию можно применить не только к электронам, но и к фотонам, то применительно к фотону E_{0i}^2 также аналогична ψ_0^2 . Исходя из сказанного, можем записать $E_{0i} = a_3 \psi_0$.

Тогда для фотонов имеем:

$$d\omega = a_2 E_{0i}^2 = a \psi_0^2.$$

Но, кроме того, $d\omega = a_4 ds$.

Заметим, амплитуда волновой функции ранее никак не была определена, поэтому можно перейти от знака пропорциональности к знаку равенства, записав $d\omega = \psi_0^2 ds$.

Волновая функция – комплексная величина, следовательно,

$$|\psi|^2 = \psi\psi^* = \psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(\varepsilon t - p x)} \cdot \psi_0 e^{\frac{i}{\hbar}(\varepsilon t - p x)} = \psi_0^2.$$

Отсюда

$$|\psi|^2 = \frac{d\omega}{ds}.$$

Итак, квадрат модуля волновой функции пропорционален вероятности попадания одного фотона на единицу площади участка облучаемой поверхности.

Очевидно, точно такой же физический смысл должна иметь волновая функция не только при описании потока фотонов, но и при описании потока электронов и других микрочастиц. Подобное статистиче-

ское толкование волновой функции было предложено М. Борном (1882–1970) в 1926 г. И лишь в 1954 г. за статистическую интерпретацию волновой функции ему была присуждена Нобелевская премия.

Если теперь провести подобные рассуждения для пространственного случая, т.е. поставить вопрос о том, какое число фотонов или других микрочастиц может находиться в микрообъеме dV в течение какого-то промежутка времени, то вероятность местонахождения микрочастицы в указанном микрообъеме dV будет определяться выражением

$$d\omega = |\psi|^2 dV, \quad (1.1.4)$$

где $dV = dxdydz$, этот объем охватывает изменение координат от x до $x+dx$, от y до $y+dy$, от z до $z+dz$.

Следовательно, в общем случае,

$$|\psi|^2 = \frac{d\omega}{dV}. \quad (1.1.5)$$

Таким образом, $|\psi|^2$ есть плотность вероятности распределения микрочастиц в пространстве, это есть вероятность местонахождения микрочастицы в единице объема геометрического пространства. $|\psi|^2$ есть плотность вероятности.

Тогда вероятность найти микрочастицу в объеме V , как следует из (1.1.5), равна

$$\omega = \int_0^V |\psi|^2 dV. \quad (1.1.6)$$

И если известна ψ -функция, соответствующая данному состоянию частицы, то вероятности различных процессов определяются однозначно, что дает возможность судить о поведении множества частиц с вероятностной точки зрения, т.е. описать их поведение методами теории вероятности.

Если считать, что местонахождение микрочастицы в пространстве - событие достоверное, т.е. частица все время находится в объеме V , то вероятность такого события всегда равна единице. Поэтому

$$\int_0^V |\psi|^2 dV = 1. \quad (1.1.7)$$

Условие (1.1.7) называется условием нормировки, поскольку это условие накладывает определенные ограничения на величину амплитуды волновой функции ψ_0 . Условие нормировки по существу есть иная форма записи закона сохранения полного числа микрочастиц в пространстве. Так как $\psi = \psi(x, y, z, t)$, то условие нормировки должно

выполняться для любого момента времени, в противном случае оно не имеет физического смысла.

Знание волновой функции позволяет описать процессы природы вероятностным способом, а также позволяет определить средние значения физических величин, например, среднее значение координаты, среднее значение скорости и др.:

При определении средних значений других физических величин часто используют операторную форму записи:

$$\langle \varepsilon \rangle = \int_0^V \psi^* \hat{\varepsilon} \psi dV, \quad \int_0^V \psi^2 dV = 1.$$

$$\langle \hat{p} \rangle = \int_0^V \psi^* \hat{p} \psi dV,$$

где $\hat{\varepsilon}$ – оператор полной энергии, \hat{p} – оператор импульса.

Среднее значение энергии при переходе из состояния m в состояние n тогда записывается следующим образом (рис. 2):

$$\langle \varepsilon \rangle = \int_0^V \psi_m^* \hat{\varepsilon} \psi_n dV = \langle m | \hat{\varepsilon} | n \rangle.$$

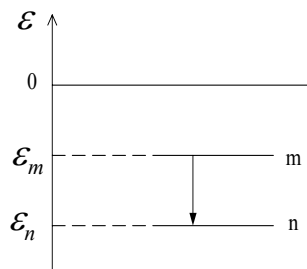


Рис. 2. Квантовый переход между двумя скачками

Допустим, микрочастица некоторое время находится в объеме $V=hs$. Тогда

$$\int_0^V |\psi|^2 dV < 1.$$

Это обстоятельство следует учитывать, например, при определении вероятности взаимодействия электронов с веществом в процессе облучения вещества потоком электронов. Допустим, облучаемое вещество представляет собой металлическую пленку.

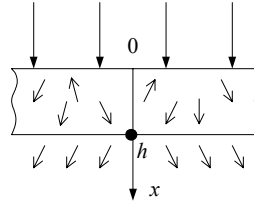


Рис. 1.4.2. Модель облучения пленки электроном

Объем облучаемой пленки изображен на рис. 1.4.2. А так как часть потока электронов проходит через пленку, то

$$\int_0^{V_1} |\psi|^2 dV < 1.$$

Следовательно, условие нормировки для волновой функции в этом конкретном случае должно иметь вид:

$$\int_{-\infty}^0 |\psi_1|^2 dx + \int_0^h |\psi_2|^2 dx + \int_h^{\infty} |\psi_3|^2 dx = 1.$$

Тогда знаменатель в выражении для среднего значения физической величины не будет равен единице. Например, теперь среднее значение энергии в пределах металлической пленки следует вычислять по формуле

$$\langle \varepsilon \rangle = \left(\int_0^h \psi^* \hat{\varepsilon} \psi \right) / \left(\int_0^h |\psi|^2 dx \right).$$

Обобщим сказанное.

1. Волновая функция сама по себе не выражает физического смысла, физический смысл имеет лишь ее квадрат модуля – он равен плотности вероятности местонахождения микрочастицы в единице объема геометрического пространства в пределах выделенного микрообъема dV .

2. В квантовой механике параметры состояния микрочастицы, например, ε, p , определяются вероятностным способом, точное значение полной энергии и импульса, а также других параметров определить невозможно, точно можно определить лишь их средние значения.

1.5. Соотношения неопределенностей

Итак, мы видели, что свет можно рассматривать и как поток световых частиц, фотонов, и как электромагнитную волну. То же самое можно сказать и об электронах и других микрочастицах. Например, в

опыте по отражению от монокристалла Ni поток электронов проявляет волновые свойства; однако во всех типах электроннолучевых трубок, например, в кинескопах телевизоров, поток электронов проявляет корпускулярные свойства, ведет себя как поток отрицательно заряженных частиц. Подчеркнем еще раз, что подобная двойственность имеет место и у других микрочастиц, а именно, всегда в природе имеются явления, в которых частицы проявляют волновые свойства, и имеются явления, в которых эти же частицы проявляют корпускулярные свойства.

Из анализа многочисленных опытов с микрочастицами с учетом волновых и корпускулярных свойств вытекает принцип неопределенности Гейзенберга, который, в сущности, представляет один из фундаментальных законов природы в микромире. С одной стороны, этот принцип имеет большое философское значение, а с другой – он находит практическое применение при выполнении некоторых конкретных расчетов. Физическая причина наличия этого закона заключается в двойственной природе материи.

Открытие закона соотношения неопределенностей связано с именем Вернера Гейзенберга. Весной 1925 г. по приглашению Н. Бора из города Геттинген (Германия) в город Копенгаген прибыл В. Гейзенберг. Там он сразу попал в обстановку научных споров, в среду людей, для которых физика была главным делом их жизни. Основной вопрос, который обсуждал Гейзенберг, состоял в следующем: почему в атоме электрон не подчиняется законам электродинамики, почему в процессе движения электрон не падает на ядро и даже не излучает, если атом не возбужден? В конце концов, после многих раздумий и обсуждений со своими коллегами по работе он пришел к выводу, что понятие траектории электрона в атоме не имеет физического смысла, оно к электрону в атоме неприменимо.

Рассмотрим на примере наиболее понятных нам световых явлений физическую причину возникновения соотношения неопределенности.

Пусть в пространстве на плоский экран I со щелью падает пучок параллельных лучей. После экрана поместим линзу, в фокальной плоскости которой расположен другой экран (рис. 1.5.1).

Тогда, как мы знаем, на втором экране будет возникать интерференционная картина, соответствующая дифракции от одной щели. Дифракционная картина будет особенно четко видна, если ширина входной щели сравнима с длиной волны света.

Условие минимума в случае дифракции от одной щели

$$a \sin \varphi = \kappa \lambda,$$

где a – ширина щели, $\kappa = 1, 2, 3, \dots$, λ – длина волны, $\kappa < a/\lambda$. Тогда угловая ширина дифракционного максимума

$$\Delta\varphi = \frac{\lambda}{a \cos \varphi}, \Delta\kappa = 1.$$

И если $a \gg \lambda$, то $\Delta\varphi \ll 1$, если $a \ll \lambda$, то $\Delta\varphi > 90^\circ$, и дифракция как в первом, так и во втором случаях наблюдаться не будет. Значит, для наблюдения четкой дифракционной картины необходимо, чтобы $a \approx \lambda$. Это обстоятельство мы используем в дальнейшем, когда будем более подробно рассматривать физическую причину возникновения соотношений неопределенностей.

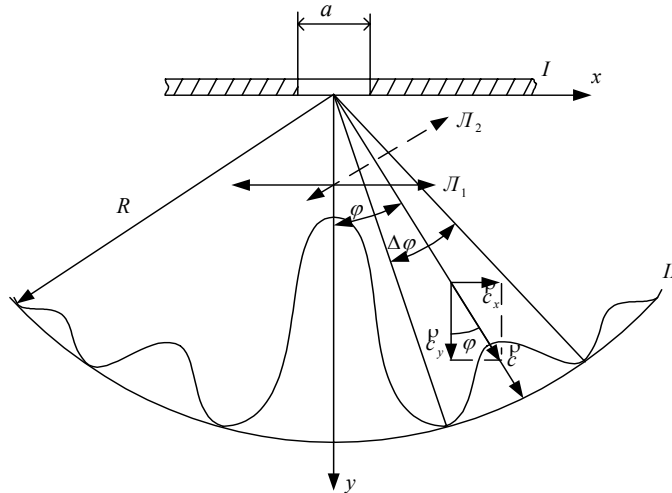


Рис. 1.5.1. Возможная схема наблюдения интерференции волн при рассеянии на щели

Если к анализу результата опыта применить корпускулярный подход, то можно считать, что после прохождения через щель поток световых частиц, фотонов, отклоняется от первоначального направления на величину угла дифракции φ . Причину такого отклонения можно видеть во взаимодействии фотонов с веществом экрана I и возникающем в результате этого рассеянии.

Положение одного фотона в потоке световых частиц в направлении оси Ox можно определить лишь с точностью, равной ширине щели a . Таким образом, неточность в определении координаты x любого из падающих фотонов будет $\Delta x = a$, поскольку в нашем распоряжении нет приборов, при помощи которых без нарушения условий исходного

опыта можно более точно определить координату фотона x . Наряду с этим существует еще и неопределенность положения фотона в пределах дифракционного максимума, который образован потоком рассеянных фотонов. Вероятность углового распределения дифрагированных фотонов не одинакова для различных углов дифракции: имеются направления, в которых фотоны отклоняются с большей вероятностью, и имеются направления, в которых фотоны практически не отклоняются, т.е. вероятность их дифракции в этом направлении практически равна нулю. Этим и объясняется наличие на экране Π участков с максимальной и минимальной освещенностями. Стало быть, неопределенность в определении направлении движения фотона обусловлена конечной шириной максимума, величину которого обозначим $\Delta\varphi$.

Итак, фотон в пространстве летит где-то в пределах угла $\Delta\varphi$, но где именно – мы не знаем, у нас нет способа, при помощи которого можно уточнить положение фотона без нарушения условий исходного опыта. Стало быть, неопределенность углового положения фотона будет равна $\Delta\varphi$.

Фотон распространяется со скоростью света c . Масса покоя фотона $m_{0\phi} = 0$, это означает, что в природе нет такой системы отсчета, в которой фотон был бы неподвижен. Однако масса движущегося фотона – так называемая релятивистская масса – всегда отлична от нуля и может быть вычислена по формуле:

$$m_{\phi} = \frac{\varepsilon}{c^2}.$$

Заметим, что понятие релятивистской массы не является общепринятым. Однако "безмассовость" фотона не противоречит наличию у него импульса $p_{\phi} = \varepsilon/c$

Импульс фотона $p = m_{\phi}c$, а проекция импульса на координатную ось Ox будет равна

$$p_x = m_{\phi}c_x.$$

Тогда неточность в определении проекции импульса на ось Ox будет равна

$$\Delta p_x = m_{\phi}\Delta c_x.$$

Из рис. 1.5.1 видно, что $c_x = c \sin \varphi$, $\Delta c_x = c \cos \varphi \Delta\varphi$, поэтому

$$\Delta p_x = m_{\phi}c \cos \varphi \Delta\varphi = \frac{h}{\lambda} \cos \varphi \Delta\varphi.$$

Таким образом, угловой неопределенности движения фотона $\Delta\varphi$ соответствует неопределенность величины проекции импульса Δp_x .

Составим теперь произведение

$$\Delta p_x \Delta x = \frac{h}{\lambda} \cos \varphi \Delta\varphi \cdot a = \frac{h}{\lambda} a \cos \varphi \Delta\varphi. \quad (1.5.1)$$

До сих пор мы использовали корпускулярный подход к объяснению явления дифракции от одной щели. Применим теперь волновые представления о свете.

Известно, что условие минимума дифракции от одной щели имеет вид:

$$a \sin \varphi = \kappa \lambda, \quad \kappa = 1, 2, 3, \dots < a/\lambda.$$

Тогда разность углов между двумя соседними минимумами, которая, собственно, и определяет угловую ширину максимума, может быть найдена из выражения:

$$a \cos \varphi \Delta\varphi = \lambda \Delta\kappa = \lambda, \quad \kappa = 1,$$

и после подстановки в (1.5.1) получаем

$$\Delta p_x \Delta x = h. \quad (1.5.2)$$

Из (1.5.2) следует: чем точнее задана координата фотона, т.е. чем меньше Δx , чем меньше ширина входной щели a , тем менее точно можно определить проекцию импульса Δp_x . И наоборот, чем точнее известна проекция импульса, т.е. чем меньше угловая ширина максимума, тем менее точно может быть определена координата микрочастицы. Это предельная точность определения координаты, ее величина не зависит от особенностей постановки опыта, так как она вытекает из закона природы.

Полученное в результате проведенных рассуждений уравнение (1.5.2) соответствует идеальному случаю, когда измерение отдельных параметров движения микрочастицы проводилось без учета ошибок эксперимента и побочных дифракционных механизмов. На самом деле погрешность опыта всегда увеличивает как Δp_x , так и Δx . Поэтому уравнение (1.5.2) следует заменить неравенством

$$\Delta p_x \Delta x > h. \quad (1.5.3)$$

Далее, можно показать, что для направления вдоль оси Oy

$$\Delta p_y \Delta y = \frac{R\lambda^3}{a^4 \cos \varphi} h,$$

где R – радиус дуги окружности экрана II . Но

$$a \approx \lambda, \cos \varphi \approx 1, R \gg a,$$

Поэтому

$$\Delta p_y \Delta y > h. \quad (1.5.4)$$

Итак, в общем случае с учетом (1.5.3) и (1.5.4) имеем:

$$\begin{aligned} \Delta p_x \Delta x &> h, \\ \Delta p_y \Delta y &> h, \\ \Delta p_z \Delta z &> h. \end{aligned} \quad (1.5.5)$$

Система неравенств (1.5.5) и представляет собой соотношения неопределенностей Гейзенберга. Мы получили их на примере дифракции света, однако они выполняются для любых микрочастиц. Соотношения неопределенностей, записанные в виде системы неравенств (1.5.5), выполняются только для проекций импульсов и координат на одноименные координатные оси. Поэтому для проекций на разноименные координатные оси правая часть неравенств (1.5.5), в частности, может быть равна нулю, например,

$$\Delta p_x \Delta y \geq 0, \quad \Delta p_z \Delta x \geq 0.$$

В этом случае проекцию импульса и координату вдоль разноименных направлений в мысленном опыте можно определить одновременно с любой точностью. Так, можно совершенно точно определить и проекцию импульса на ось Ox и координату y . В этом случае $\Delta p_x = 0$, $\Delta y = 0$.

Из системы неравенств (1.5.5) для проекций импульса и радиуса вектора на соответствующие координатные оси можно получить еще одно неравенство, связывающее между собой неопределенность величины полной энергии микрочастицы с неопределенностью момента времени, когда частица имеет указанную полную энергию. Покажем это на примере фотона.

Пусть F есть направление, вдоль которого фотон движется со скоростью c . Для направления F запишем соотношение неопределенности:

$$\Delta F \Delta F > h, \quad \Delta p \Delta r > h. \quad (1.5.6)$$

Энергия фотона

$$\varepsilon_\phi = m_\phi c^2 = pc.$$

Импульс и координата фотона в момент времени t :

$$p = \frac{\varepsilon}{c}, \quad r = ct.$$

Тогда неопределенность значения импульса и неопределенность значения координаты фотона соответственно равны

$$\Delta p = \frac{\Delta \varepsilon}{c}, \quad \Delta r = c \Delta t.$$

и после подстановки найденных значений в (1.5.6) получаем

$$\Delta \epsilon \Delta t > h. \quad (1.5.7)$$

Установленное неравенство (1.5.7) справедливо не только для фотонов, но и для иных микрочастиц.

Физический смысл неравенства (1.5.7) следующий: чем точнее известен момент времени, когда была определена энергия микрочастицы, тем менее точно может быть определена ее полная энергия, и наоборот. А применительно к свойствам самой системы его можно сформулировать так: чем меньше длительность некоторого энергетического состояния системы, тем больше неопределенность в знании ее полной энергии.

Так как

$$p_x = mv_x,$$

то

$$\Delta v_x \Delta x > \frac{h}{m}. \quad (1.5.8)$$

Неравенство (1.5.8) позволяет установить границу применения классической и квантовой механики. Так, если координата микрочастицы определяется настолько точно, что неопределенность Δx ее положения в пространстве меньше характерного линейного размера частицы, то при анализе ее движения можно применять корпускулярный подход, если же эта неопределенность больше ее характерного размера, то для описания движения необходимо использовать волновую функцию. (Характерным размером может быть, например, размер атома или молекулы).

Допустим, нам известен способ, с помощью которого можно определить скорость электрона в атоме с точностью $\Delta v_x = 1 \text{ мм/с}$. Тогда из (1.5.8) следует, что $\Delta x \approx 0,7 \text{ м}$. В этом случае $\Delta x \gg R$, где R – радиус ядра атома. Такой электрон в процессе движения проявляет только волновые свойства. Если же эта скорость определена, допустим, в кинескопе телевизора, то электрон следует рассматривать как частицу.

Таким образом, движение электрона в атоме, в кристаллической решетке твердого тела может быть описано с помощью волновой функции, его положение в пространстве определяется величиной плотности вероятности.

Соотношение неопределенностей не отрицает возможность одновременного определения координаты и импульса микрочастицы, их одновременное измерение возможно лишь с определенной точностью. В этом утверждении заключается отказ от некоторых представлений, укоренившихся в физике того времени. Так, в классической физике

широко пользуются понятием траектории движения материальной точки, траектории движения частицы, причем под траекторией понимается зависимость координаты, определяющей положение материальной точки в пространстве, от времени. Знание траектории предполагает знание с любой точностью и координаты, и скорости (координаты и импульса). В классической механике координата и скорость материальной точки в любой момент времени в принципе могут быть определены одновременно с любой точностью, это значит, что движение материальной точки, движение центра масс в пространстве происходит по определенной траектории. В квантовой механике одновременное абсолютно точное определение координаты и импульса микрочастицы в принципе невозможно. Поэтому понятие траектории движения отсутствует, оно не имеет физического смысла. Мы, конечно, можем указать путь, пройденный электроном, но тогда ничего не можем сказать о том, в какой момент времени электрон будет занимать то или иное положение в пространстве. В классической механике всегда имеется возможность однозначно предсказать будущее по прошедшему. В квантовой механике однозначность предсказания заменяется вероятностью предсказания.

Из соотношений неопределенности вытекает принцип дополнительности. Он был сформулирован Н. Бором в виде следующего утверждения: координату и импульс микрочастицы нельзя абсолютно точно измерить не только одновременно, но и с помощью одного и того же прибора.

В самом деле, чтобы измерить импульс атома и при этом не очень сильно его изменить в результате воздействия на атом самого прибора, необходим очень легкий подвижный датчик, способный перемещаться вместе с атомом в процессе измерения. Но такая подвижность приведет к тому, что его положение в пространстве окажется весьма неопределенным. Для измерения координаты необходим прибор с очень большой массой датчика. Поэтому при попадании частицы в такой датчик положение датчика в пространстве меняться не будет. Таким образом, в природе всегда существуют две сопряженные физические величины, одновременное измерение которых в принципе невозможно. Такими сопряженными величинами, в частности, являются координата и импульс частицы, потенциальная и кинетическая энергии и т.д. Гносеологическая причина несовместимости дополнительных понятий заключается в двойственной природе материи. Этот закон является универсальным и охватывает все без исключения явления природы.

1.6. Уравнение Шредингера

Уравнение Шредингера является основным законом квантовой механики, его роль является такой же, какую второй закон Ньютона играет в классической механике.

Эрвин Шредингер (1887–1961) в 1911 г. окончил Венский университет. В 1925 г. он стал профессором Цюрихского университета. Шредингер знал, что в природе существует оптико-механическая аналогия, которую впервые установил Гельмгольц. Но Гельмгольц доказал ее лишь для геометрической оптики, в которой не учитываются волновые свойства света. Шредингер же предположил, что оптико-механическая аналогия сохраняется и в волновой оптике. Это значит, что любое движение частиц можно рассматривать как распространение некоторой волны.

Квантовая механика – это раздел физики, описывающий движение микрочастиц в пространстве с учетом волновых и корпускулярных свойств материи. Квантовая механика рассматривает движение только тех объектов, которые в процессе движения проявляют волновые свойства. Поэтому квантовая механика движение макротел вообще не описывает. Критерий, с помощью которого можно указать границу применимости квантовой механики, определяют соотношения неопределенностей.

Если $\Delta x \geq z$ или $\Delta v_x \geq v_x$, где z – характерный размер частицы, то для решения задачи следует применять квантовую механику. Если же $\Delta x \ll z$ или $\Delta v_x \ll v_x$, то движение микрочастицы можно рассматривать без учета ее волновых свойств, и следует применять классическую механику.

Слово "механика" в термине "квантовая механика" как бы подчеркивает, что эта наука изучает законы движения микрочастиц, а не их природу. Подобно тому, как классическая механика занимается изучением движения объектов, не вдаваясь в объяснение природы этих объектов, так и квантовая механика объясняет движение электронов вокруг ядер атомов на основе тех и только тех свойств ядер и электронов, которые важны для решения данной конкретной задачи.

Теоретическое объяснение законов теплового излучения, явления фотоэффекта, природы и свойств рентгеновских лучей, гипотеза де Бройля о волнах материи – все это были важнейшие этапы в развитии теоретических основ физики атома, молекул, твердого тела. Однако эти результаты явились лишь предварительными этапами при обосновании уравнения, описывающего движение электрона с учетом его

двойственной природы – волновой и корпускулярной. Решающий шаг в этом направлении сделал Шредингер в 1926 г., когда получил уравнение, с помощью которого оказалось возможным описать движение электрона и других микрочастиц с учетом волновых и корпускулярных свойств. Это уравнение отображает один из основных законов природы в области микромира. И подобно тому, как все основные законы природы не выводятся, а постулируются, устанавливаются по догадке, так и это уравнение не выводится, а постулируется, устанавливается на основе физической аналогии с использованием некоторой доли физической интуиции.

В физике до сих пор мы знали два закона природы, отображающих корпускулярные и волновые свойства материи.

1. Второй закон Ньютона:

$$F = m \frac{d^2x}{dt^2}. \quad (1.6.1)$$

Решением уравнения (1.6.1) является уравнение траектории материальной точки в пространстве. Ограничимся пока одномерным движением вдоль координаты x .

2. Волновое уравнение для напряженности электрического поля:

$$\frac{\partial^2 E}{\partial x^2} = \frac{1}{v_\phi^2} \frac{\partial^2 E}{\partial t^2}. \quad (1.6.2)$$

Решением уравнения (1.6.2) является уравнение электромагнитной волны

$$E = E_0 \exp[-i(\omega t - kx)] = E_0 \exp\left[-\frac{i}{\eta}(\varepsilon t - px)\right]. \quad (1.6.3)$$

Если теперь сравнить между собой уравнения (1.6.1) и (1.6.2), то уравнение Шредингера является как бы промежуточным уравнением, в котором учтены и волновые, и корпускулярные свойства микрочастиц, оно играет точно такую же роль, какую в классической играет второй закон Ньютона, а в электродинамике – волновое уравнение.

Отметим, что в квантовой механике понятия силы, кинетической энергии, траектории не используются, так как здесь они не имеют физического смысла. Объясняется это тем, что наличие силы позволяет из (1.6.1) определить траекторию движения микрочастицы. Но само понятие траектории в квантовой механике отсутствует, поэтому должно отсутствовать и понятие силы.

Рассмотрим теперь те соображения, которые могут привести к установлению уравнения Шредингера. Наши рассуждения проведем на примере свободного электрона. Как и раньше, будем исходить из того,

что волновые свойства электрона описываются волновой функцией ψ в виде плоской волны, введенной по аналогии с плоской электромагнитной волной (3).

Волновая функция свободного электрона по своей структуре подобна уравнению плоской электромагнитной волны, поэтому Шредингер предположил, что в природе должно существовать такое волновое уравнение, решением которого является волновая функция ψ :

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{1}{v_\phi^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2}, \quad (1.6.4)$$

где v_ϕ – фазовая скорость волны, описывающая движение свободного электрона с вероятностной точки зрения.

Таким образом, Шредингер, как и де Бройль, при формулировке основного уравнения квантовой механики использовал метод аналогии. Так как исходное уравнение (1.6.4) является волновым, то и сама квантовая механика также еще называется волновой механикой.

Однако уравнение (1.6.4) не является окончательным, а представляет лишь некоторый промежуточный результат в процессе формулировки основного уравнения, поскольку в записанном виде это уравнение характеризует движение микрочастицы лишь с волновой точки зрения.

Учтем теперь ее корпускулярные свойства. Ранее мы нашли выражение для фазовой скорости волновой функции, описывающей движение свободного электрона в пространстве:

$$v_\phi = \frac{dx}{dt} = \frac{\varepsilon}{p},$$

Здесь ε – полная энергия электрона, p – импульс электрона. Волновая функция свободного электрона

$$\psi = \psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(\varepsilon t - px)}.$$

Поэтому

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{p^2}{\varepsilon^2} \left(-\frac{\varepsilon^2}{\hbar^2} \psi \right) = -\frac{p^2}{\hbar^2} \psi. \quad (1.6.5)$$

Кинетическая энергия свободного электрона

$$K = \frac{p^2}{2m}$$

или

$$p^2 = 2mK.$$

Подставим полученное выражение для квадрата импульса в (1.6.5):

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} K \psi. \quad (1.6.6)$$

Уравнение (1.6.6) справедливо лишь для частного случая движения свободного электрона. Попробуем теперь уравнение (1.6.6) видоизменить так, чтобы оно было справедливым не только для свободного электрона, но и для электрона в поле других консервативных сил. В этом случае кинетическая энергия электрона

$$K = \varepsilon - U(x), \quad (1.6.7)$$

где $U(x)$ – потенциальная энергия электрона.

Следовательно, в общем случае,

$$p^2 = 2mK = 2m(\varepsilon - U(x)).$$

Подставим найденное выражение в (1.6.6):

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} (\varepsilon - U(x)) \psi$$

или

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (\varepsilon - U(x)) \psi = 0. \quad (1.6.8)$$

Уравнение (1.6.8) и есть основное уравнение квантовой механики для микрочастицы в поле внешних консервативных сил, причем в случае свободного электрона потенциальная энергия электрона $U = 0$.

Так как в уравнение (1.6.8) время явным образом не входит, то его решение будет одним и тем же для любого момента времени. Поэтому уравнение (1.6.8) называется стационарным уравнением Шредингера.

При выводе уравнения Шредингера была допущена физическая неточность: в (1.6.7) кинетическая энергия K была выражена через потенциальную энергию U , что противоречит соотношению неопределенности. Действительно, из физического смысла уравнения (1.6.7) следует, что в одном и том же опыте одновременно известны две физически сопряженные величины – кинетическая и потенциальная энергии, т.е. в одном и том же опыте можно определить и точное значение импульса, и точное значение координаты, что в принципе невозможно. Единственным оправданием для Шредингера является то, что при составлении своего уравнения Шредингер не знал закона – соотношения неопределенности, этот закон был опубликован позднее.

В общем случае, для реального пространства трех измерений, стационарное уравнение будет иметь следующий вид:

$$\Delta \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (\varepsilon - U(\mathbf{r})) \psi = 0, \quad (1.6.9)$$

где Δ – оператор Лапласа,

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

Перейдем к формулировке нестационарного уравнения Шредингера. Так как волновая функция свободного электрона

$$\psi = \psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)},$$

то

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \epsilon \psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)} = -\frac{i}{\hbar} \epsilon \psi$$

или

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \epsilon \psi. \quad (1.6.10)$$

Из (1.6.9) находим $\epsilon \psi$:

$$\epsilon \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + U(\mathbf{r}) \psi$$

Тогда с учетом (1.6.10) имеем:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + U(\mathbf{r}) \psi, \quad (1.6.11)$$

Уравнение (1.6.11) – нестационарное уравнение Шредингера. Запишем его в иной форме:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\mathbf{r}) \right) \psi. \quad (1.6.12)$$

В квантовой механике каждой физической величине соответствует свой оператор. При этом для операторов физических величин в квантовой механике обычно сохраняются соотношения, характерные для самих величин в классической механике. В уравнении (1.6.12) выражение в круглых скобках есть математическая операция, она называется оператором Гамильтона:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \hat{U}, \quad (1.6.13)$$

$\hat{U} = U(\mathbf{r})$ – оператор потенциальной энергии. Тогда нестационарное уравнение Шредингера в операторной форме записи:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi. \quad (1.6.14)$$

Из (1.6.10) и (1.6.14) получаем стационарное уравнение Шредингера в операторной форме записи:

$$\hat{H}\psi = \varepsilon\psi, \quad (1.6.15)$$

где ε – собственное значение, ψ – собственная функция оператора H . Введем оператор импульса для трех его проекций. Так как

$$\frac{\partial\psi}{\partial x} = \frac{i}{\eta} p_x \psi_0 e^{-\frac{i}{\eta}(et - px)} = \frac{i}{\eta} p_x \psi,$$

то

$$\left(-i\eta \frac{\partial}{\partial x}\right)\psi = p_x \psi; \quad p_x \psi = p_x \psi, \quad p_x = -i\eta \frac{\partial}{\partial x}.$$

Аналогично получаем

$$p_y = -i\eta \frac{\partial}{\partial y}, \quad p_z = -i\eta \frac{\partial}{\partial z}, \quad \hat{p} = -i\eta \nabla, \quad \nabla = \frac{\partial}{\partial x} \hat{i} + \frac{\partial}{\partial y} \hat{j} + \frac{\partial}{\partial z} \hat{k},$$

где \hat{p} – оператор импульса.

Кинетическая энергия электрона

$$K = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2m} (\hat{p} \cdot \hat{p}),$$

а ее оператор

$$\hat{K} = \frac{1}{2m} (-\eta^2 \nabla \nabla) = -\frac{\eta^2}{2m} \Delta, \quad \Delta = \nabla \cdot \nabla.$$

Тогда с учетом (1.6.13) оператор Гамильтона

$$\hat{H} = \hat{K} + \hat{U}.$$

Если оператор физической величины имеет собственное значение, т.е. в результате действия оператора на волновую функцию перед ней в качестве коэффициента появляется некоторая вещественная физическая величина (импульс, полная энергия и др.), то такой оператор называется эрмитовым, коэффициент перед волновой функцией называется собственным значением оператора, а сама волновая функция – собственной функцией оператора. Средние значения физических величин можно вычислить только при использовании эрмитовых операторов. Например,

$$\langle \varepsilon \rangle = \int_0^V \psi_n^* \hat{H} \psi_n dV = \langle n | \hat{H} | n \rangle.$$

В общем случае, оператор, действующий на волновую функцию ψ , обозначим L . Тогда

$$\hat{L}\psi = L\psi,$$

где L – собственное значение оператора (число), ψ – собственная функция оператора \hat{L} .

1.7. Электрон в потенциальной яме

Задача о движении электрона в потенциальной яме представляет большой интерес с познавательной точки зрения, поскольку потенциальная яма является первым приближением к модели того силового поля, которое удерживает электроны в атоме, в твердом теле. Конечно, реальная задача всегда намного сложнее той, которую мы будем рассматривать здесь. Тем не менее, общие закономерности, которые нами будут установлены, в общих чертах проявляются и в реальных условиях, т.е. отражают реально существующие в природе физические закономерности.

Прежде всего, что называется потенциальной ямой? Потенциальной ямой называется зависимость потенциальной энергии микрочастицы от ее координаты, имеющая минимум.

Если в потенциальной яме находится частица и ее полная энергия равна ϵ , то в процессе движения она в основном будет находиться в пределах потенциальной ямы. При этом частица будет испытывать непрерывные столкновения с ее стенкой, т.е. при таком движении в пространстве возникает некий колебательный процесс.

Рассматриваемый здесь вопрос о движении электрона в потенциальной яме является важнейшим из тех, что изучались нами до сих пор. В самом деле, нам потребуются результаты анализа законов движения электрона в потенциальной яме при изложении физики твердого тела, в частности, физики полупроводников, при изложении физики атомов, молекул, при изложении физики атомного ядра.

Итак, область применения результатов такого анализа оказывается весьма обширной. Кроме того, результаты рассматриваемой теории позволят предсказать новое физическое явление, которое имеет необычное, парадоксальное проявление, которое даже противоречит "здравому" физическому смыслу, но, тем не менее, оно наблюдается в природе и даже нашло практическое применение. Здесь имеются в виду так называемые барьерные эффекты на границе потенциальных ям, в частности, туннельный эффект.

Любая одномерная потенциальная яма характеризуется двумя основными параметрами: функциональной зависимостью потенциальной энергии от координаты $U = U(x)$ и шириной потенциальной ямы l . Оказывается, этих данных вполне достаточно для описания в ней движения электронов на основе решения уравнения Шредингера. Так как точный контур реальной ямы всегда оказывается достаточно сложным, а во многих случаях даже и неизвестным, то для решения

задачи реальную модель потенциальной ямы заменим ее упрощенной зависимостью $U(x)$, имеющей вид прямоугольной потенциальной ямы. В этом случае можно решить уравнение Шредингера, причем решения получаются достаточно простыми и аналитическими, и, что в данном случае особенно важно, они достаточно хорошо соответствуют опыту.

1.7.1. Линейный гармонический осциллятор

Осциллятором называется любая совершающая колебания физическая система. Если колебания совершаются по гармоническому закону, то осциллятор называется гармоническим. Различают классический и квантовый осцилляторы. Классическим осциллятором называют любую механическую систему, совершающую колебания около положения равновесия в соответствии с законами классической механики. Понятие осциллятора применяется также и к немеханическим колебательным системам, например, к колебаниям электронов в атомах, в твердом теле и т. д. Квантовым осциллятором называется система колеблющихся частиц, движение которых подчиняется квантовым законам.

а) Классический осциллятор

В качестве примера рассмотрим гармонический осциллятор в виде груза, подвешенного на пружине (рис. 1.7.1.1).

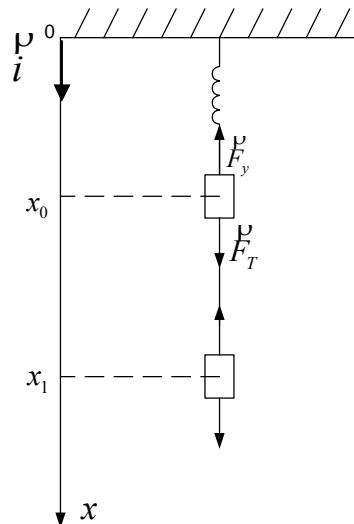


Рис. 1.7.1.1. Пружинный гармонический осциллятор

Пусть x_0 – координата центра тяжести груза в положении равновесия, x_1 – координата в момент времени t . Тогда отклонение от положения равновесия в любой момент времени будет $x = x_1 - x_0$. Как следует из рис. 1.7.1.1, на груз массой m будут действовать сила упругости F_y^p и сила тяжести F_T^p .

Если отклонение от положения равновесия груза незначительно, то

$$F_y^p = -kx\vec{l}, \quad (1.7.1.1)$$

где x – отклонение от положения равновесия, k – коэффициент упругой силы, \vec{l} – единичный направляющий вектор. Сила тяжести груза равна

$$F_T^p = mg\vec{l},$$

где m – масса груза.

Груз, выведенный из положения равновесия, будет совершать колебания относительно положения равновесия. В отсутствие действия сил трения и сил сопротивления среды колебания будут незатухающими. Так как сила F_y^p консервативна, то

$$F_y^p = -\frac{dU^p}{dx}\vec{l}, \quad (1.7.1.2)$$

где U – потенциальная энергия сжатой или растянутой пружины.

В уравнениях (1.7.1.1) и (1.7.1.2) левые части равенства одинаковы, поэтому

$$dU = kx dx. \quad (1.7.1.3)$$

После интегрирования (1.7.1.3) получаем:

$$U = \frac{kx^2}{2}. \quad (1.7.1.4)$$

Так как груз совершает колебательные движения, то в любой момент времени под действием этих сил груз перемещается с ускорением \vec{a} . По второму закону Ньютона произведение массы на ускорение равно векторной сумме действующих на тело сил:

$$F_y^p + F_T^p = m\vec{a}$$

или

$$m\vec{a} = -kx + mg. \quad (1.7.1.5)$$

Решением уравнения (1.7.1.5), удовлетворяющим начальному условию $x=x_0$ при $t=0$, является выражение

$$x = \frac{1}{\omega_0^2} (g + (\omega_0^2 x_0 - g) \cos \omega_0 t), \quad (1.7.1.6)$$

где $\omega_0^2 = \frac{k}{m}$, ω_0 - собственная круговая частота колебаний.

Из (1.7.1.4) следует, что потенциальная энергия меняется по параболическому закону, а так как полная энергия в процессе движения постоянна, то и зависимость кинетической энергии от координаты также меняется по параболическому закону, хотя во времени кинетическая энергия при выбранных начальных условиях меняется по закону, пропорциональному $\sin^2 \omega_0 t$.

Рассмотрим теперь движение электрона в атоме водорода, находящегося в основном (невозбужденном) состоянии. Находясь в этом состоянии, электрон вращается вокруг ядра, с наибольшей вероятностью двигаясь по сферической поверхности. Если теперь провести сечение поверхности, то движение электрона можно рассматривать как движение по окружности (рис. 1.7.1.2).

Так как начало координат находится в центре ядра, то в процессе движения радиус-вектор \vec{r} электрона будет непрерывно вращаться. Система отсчета, связанная с электроном, является неинерциальной. Запишем второй закон Ньютона в неинерциальной системе отсчета:

$$m\vec{a} = \vec{F} + \vec{F}_u, \quad (1.7.1.7)$$

где

$$\vec{F} = -\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \vec{e}_r, \quad \vec{F}_u = m\omega_0^2 r \vec{e}_r, \quad \vec{e}_r = \frac{\vec{r}}{r};$$

r - расстояние между электроном и ядром в атоме водорода, находящегося в основном состоянии, \vec{F}_u - центробежная сила инерции, a - ускорение электрона в собственной системе отсчета, равное нулю, \vec{e}_r - единичный направляющий вектор.

После подстановки найденных значений в (1.7.1.7) получаем:

$$-\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} + m\omega_0^2 r = 0.$$

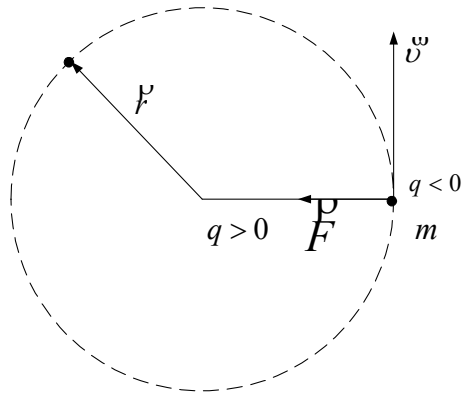


Рис. 1.7.1.2. Модель кругового движения электрона

Отсюда

$$\omega_0^2 = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 m r^3}, \quad \nu_0 = \frac{\omega_0}{2\pi}, \quad T_0 = \frac{1}{\nu_0}; \quad q = e; \quad (1.7.1.8)$$

где ν_0 – частота вращения электрона вокруг ядра, T_0 – период, e – заряд электрона. После подстановки табличных значений в (1.7.1.8) имеем

$$\nu_0 = 6,56 \cdot 10^{15} \text{ Гц}, \quad T_0 = 1,5 \cdot 10^{-16} \text{ с}.$$

б). Квантовый осциллятор

Особенности физических свойств квантового осциллятора изучим на примере параболической зависимости потенциальной энергии от координаты, как это имело место в классическом осцилляторе. В отличие от классической механики, в квантовой механике понятие силы отсутствует. Поэтому нецелесообразно в выражении для потенциальной энергии использовать коэффициент упругости, как коэффициент пропорциональности между силой и отклонением микрочастицы от положения равновесия.

Так как $k = m\omega_0^2$, то после его подстановки в (1.7.1.4) получаем

$$U = \frac{m\omega_0^2}{2} x^2. \quad (1.7.1.9)$$

На рис. 1.7.1.3 приведен график потенциальной энергии микрочастицы, построенный по формуле (1.7.1.9).

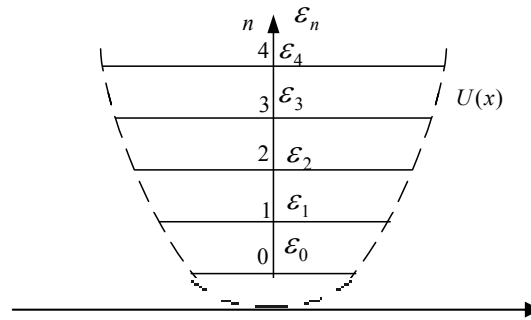


Рис. 1.7.1.3. Потенциальная функция и уровни энергии гармонического осциллятора

В одномерном случае стационарное уравнение Шредингера

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (\varepsilon - U(x)) \psi = 0 \quad (1.7.1.10)$$

Решениями уравнения (1.7.1.10) являются собственные волновые функции вида

$$\psi_n(x) \sim P_n(x) e^{-\alpha x^2},$$

где $n = 0, 1, 2, 3, \dots$; $\alpha = \text{const}$; $P_n(x)$ – полиномы Чебышева-Эрмита.

По определению, каждой собственной волновой функции $\psi_n(x)$ соответствует собственное значение полной энергии оператора Гамильтона ε_n ; можно показать, что дифференциальное уравнение (1.7.1.10) имеет решение, удовлетворяющее так называемым стандартным физическим условиям, только в том случае, если полная энергия колеблющейся микрочастицы, в частности электрона, дискретна и равна

$$\varepsilon_n = \hbar \omega_0 \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (1.7.1.11)$$

Введем новую переменную $z = x\sqrt{\alpha}$. Тогда полиномы $P_n(x)$ имеют достаточно простое выражение, особенно при малых значениях n . В табл. 1.7.1. приводятся некоторые значения полиномов Чебышева-Эрмита (a_1, a_2, a_3, a_4 – вещественные числа).

n	0	1	2	3	4
-----	---	---	---	---	---

$P_n(z)$	1	$a_1 z$	$a_2 \left(z^2 - \frac{1}{2} \right)$	$a_3 \left(z^3 - \frac{3}{2} z \right)$	$a_4 \left(z^4 - 3z^2 + \frac{3}{4} \right)$
----------	---	---------	--	--	---

Таблица 1.7.1. Значения полиномов Чебышева–Эрмита

Как следует из (1.7.1.11), значения полной энергии квантованы (дискретны), каждое из них определяет величину полной энергии колебательного движения микрочастицы. Так как различным значениям n соответствуют определенные значения энергии колебаний, то n называется колебательным квантовым числом.

На рис. 1.7.1.3 приводятся различные значения n и соответствующие им уровни колебательной энергии ε_n . Существенно, что уровни гармонического осциллятора эквидистантны: $\Delta\varepsilon_n = \hbar\omega_0$.

Из (1.7.1.11) следует, что наименьшему значению полной энергии соответствует $n = 0$. Это значит, что микрочастицы вещества не могут находиться в состоянии покоя даже при $T = 0 \text{ K}$. Даже при абсолютном нуле температуры они совершают непрерывные колебания. Такие колебания называются нулевыми. Их существование, также как величина нулевой энергии, является прямым следствием соотношений неопределенности Гейзенберга.

В качестве примера вычислим полную энергию основного состояния электрона в атоме водорода, полученную в результате решения уравнения Шредингера (1.7.1.10), и сравним с результатом вычислений по формуле (1.7.1.11) при $n = 0$.

Как будет показано в дальнейшем, энергия электрона в основном состоянии

$$\varepsilon_0 = hcR, \quad (1.7.1.12)$$

где h – постоянная Планка, c – скорость света в вакууме, R – постоянная Ридберга. Подставив в (1.7.1.12) табличные значения, получим $\varepsilon_0 = 13,6 \text{ эВ}$. Тот же результат получится, если в тождество (11) подставить значения $n = 0$ и периода колебаний $T_0 = 1,5 \cdot 10^{-16} \text{ с}$, вычисленного ранее в пункте а).

Аналогичный результат можно получить, используя уравнение (1.7.1.10) при рассмотрении движения иона в кристаллической решетке твердого тела. Оказывается, что и в этом случае даже при температуре абсолютного нуля ионы совершают непрерывные колебания около положения равновесия. Таким образом, в природе не существует неподвижных микрочастиц (электронов, атомов и других микрочас-

тиц), микрочастицы любого физического происхождения всегда, при любой температуре находятся в непрерывном движении.

1.7.2. Движение электрона в потенциальной яме с плоским дном

Как уже отмечалось ранее, график зависимости потенциальной энергии $U(x)$ от координаты x может иметь достаточно сложный вид. В частности, он может иметь вид, изображенный на рис.1.7.2.1. Но уравнение Шредингера для таких потенциальных энергий в общем случае трудно поддается расчету. Поэтому для дальнейшего анализа заменим реальную функцию $U(x)$ ее упрощенным графическим представлением в виде потенциальной ямы с плоским дном (рис. 1.7.2.2). В этом случае уравнение Шредингера решается достаточно просто.

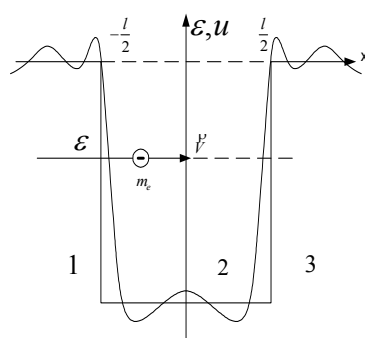


Рис. 1.7.2.1 Потенциальная яма со сложным профилем дна

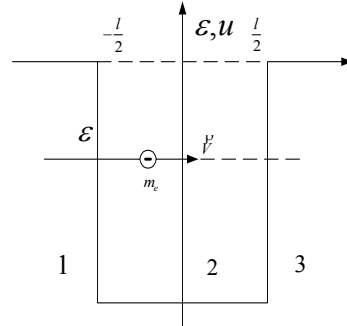


Рис. 1.7.2.2. Потенциальная яма с плоским дном

Из рис. 1.7.2.2 видно, что в пределах потенциальной ямы $U(x) = \text{const}$, $F = -\frac{dU}{dx} = 0$. Следовательно, на электрон в этой области сила не действует, сила возникает только на границах областей 1–2 и 2–3. Таким образом, движение электрона в пределах потенциальной ямы происходит по инерции с постоянной скоростью, его кинетическая энергия K постоянна.

Рассмотрим первоначально движение электрона с полной энергией $\varepsilon < 0$. Все пространство разделим на три физически различных области 1, 2, 3. В областях 1 и 3: $U = 0$, $\varepsilon = K + U < 0$, значит, кинетическая энергия получает отрицательное значение, и скорость становится мнимой величиной. И то, и другое в классической механике не имеет физического смысла и не может реализоваться. В квантовой же механике возникает своеобразная статистическая трактовка. В области 2

$\varepsilon > U < 0$. Кинетическая энергия положительная, скорость электрона – постоянная величина.

Запишем теперь нестационарное уравнение Шредингера:

$$\hat{H}\psi = i\eta \frac{\partial \psi}{\partial t}, \quad (1.7.2.1)$$

$$\hat{H} = -\frac{\eta^2}{2m_e} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x).$$

В нашем случае потенциальная энергия не зависит от времени, поэтому для решения (1.7.2.1) можно применить метод разделения переменных Фурье, записав волновую функцию в виде произведения двух функций, одна из которых зависит только от координаты x , другая – только от времени t :

$$\psi(x, t) = \psi(x)\psi(t). \quad (1.7.2.2)$$

Найденное выражение (1.7.2.2) для волновой функции подставим в уравнение (1.7.2.1), при этом учтем, что оператор Гамильтона на временную часть волновой функции не действует:

$$\psi(t)\hat{H}\psi(x) = i\eta\psi(x) \cdot \psi'(t).$$

Разделим переменные:

$$\frac{\hat{H}\psi(x)}{\psi(x)} = i\eta \frac{\psi'(t)}{\psi(t)} = C_1. \quad (1.7.2.3)$$

Левая часть уравнения (1.7.2.3) зависит только от координаты, правая часть – только от времени. Это возможно, если каждая из частей уравнения (1.7.2.3) равна постоянной величине C_1 .

Итак, имеем:

$$\hat{H}\psi(x) = C_1\psi(x).$$

Но ранее было показано, что

$$\hat{H}\psi(x) = \varepsilon\psi(x), \quad (1.7.2.4)$$

где ε – собственное значение оператора Гамильтона. Следовательно, $C_1 = \varepsilon$. Подставив значение C_1 в (1.7.2.3), после сокращения на $\psi(x)$ получим дифференциальное уравнение

$$\frac{d\psi(t)}{\psi(t)} = -i \frac{\varepsilon}{\eta} dt,$$

решением которого является функция

$$\psi(t) = \psi_0 e^{-\frac{i\varepsilon t}{\eta}}. \quad (1.7.2.5)$$

Тогда общее решение дифференциального уравнения (1.7.2.1) с учетом условия (1.7.2.2) будет иметь вид

$$\psi(x, t) = \psi(x)_0 e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon t}. \quad (1.7.2.6)$$

Здесь постоянная интегрирования ψ_0 вошла в функцию $\psi(x)$, это возможно, поскольку вид волновой функции $\psi(x, t)$ нами еще не был определен. Заметим, если $U = U(x, t)$, т.е. потенциальная энергия зависит еще от времени, то метод разделения переменных Фурье применять нельзя, и представление волновой функции в виде произведения двух волновых функций будет неправомерным.

Теперь займемся координатной частью дифференциального уравнения (1.7.2.4), для чего запишем его в развернутом виде:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + U \psi(x) &= \varepsilon \psi(x), \\ \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \frac{2m_e}{\hbar^2} (\varepsilon - U) \psi(x) &= 0, \end{aligned} \quad (1.7.2.7)$$

Уравнение (1.7.2.7) – стационарное уравнение Шредингера. Применим его для различных областей пространства.

Для простоты дальнейших вычислений введем новые обозначения:

$$a_1^2 = -\frac{2m_e}{\hbar^2} \varepsilon > 0, \quad a_2^2 = \frac{2m_e}{\hbar^2} (\varepsilon - U). \quad (1.7.2.8)$$

Тогда в новых обозначениях дифференциальное уравнение (1.7.2.7) в различных областях пространства будет иметь разный вид.

В области 1

$$\psi_1''(x) - a_1^2 \psi_1(x) = 0.$$

Его решение

$$\psi_1(x) = \psi_{01} e^{a_1 x} + \psi_{02} e^{-a_1 x}, \quad x \leq -\frac{l}{2}.$$

Так как электрон в область 1 глубоко проникнуть не может, то

$$\begin{aligned} \psi_1(x) \Big|_{x=-\infty} &= 0, \quad \psi_{02} = 0; \\ \psi_1(x) &= \psi_{01} e^{ia_1 x}. \end{aligned} \quad (1.7.2.9)$$

В области 2

$$\psi_2''(x) + a_2^2 \psi_2(x) = 0.$$

Его решение

$$\psi_2(x) = \psi_{03} e^{ia_2 x} + \psi_{04} e^{-ia_2 x}. \quad (1.7.2.10)$$

В области 3

$$\psi_3''(x) - a_1^2 \psi_3(x) = 0.$$

Его решение

$$\Psi_3(x) = \Psi_{05}e^{a_1x} + \Psi_{06}e^{-a_1x}, \quad x \geq \frac{l}{2}.$$

Так как электрон и в область 3 глубоко проникнуть не может, то

$$\Psi_3(x)|_{x=\infty} = 0, \quad \Psi_{05} = 0;$$

или

$$\Psi_3(x) = \Psi_{06}e^{-a_1x}. \quad (1.7.2.11)$$

После подстановки в (1.7.2.6) найденных решений (1.7.2.9)–(1.7.2.11) получим волновые функции для различных областей пространства:

$$\begin{aligned} \Psi_1(x, t) &= \Psi_{01}e^{-\frac{i}{\hbar}(Et + \hbar a_1 x)}, \\ \Psi_2(x, t) &= \Psi_{03}e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \hbar a_2 x)} + \Psi_{04}e^{-\frac{i}{\hbar}(Et + \hbar a_2 x)}, \\ \Psi_3(x, t) &= \Psi_{06}e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \hbar a_1 x)}, \end{aligned}$$

Из анализа вида волновых функций следует, что в 1-й и 3-й областях фазовые скорости имеют мнимую величину, хотя сами волновые функции отличны от нуля. Это означает, что квантовая механика предсказывает возможность прохождения через потенциальный барьер, но не объясняет физическую природу возможности прохождения. Парадоксальность ситуации состоит в том, что в этом случае нарушается закон сохранения энергии. В области 2 фазовая скорость – вещественная величина, волновая функция состоит из двух плоских волн, распространяющихся в противоположных направлениях.

Для определения постоянных интегрирования Ψ_{01} , Ψ_{03} , Ψ_{04} , Ψ_{06} воспользуемся граничными условиями для волновых функций и их производных:

$$\begin{pmatrix} \Psi_1(x) = \Psi_2(x) \\ \Psi_1'(x) = \Psi_2'(x) \end{pmatrix}_{x=l/2}; \quad \begin{pmatrix} \Psi_2(x) = \Psi_3(x) \\ \Psi_2'(x) = \Psi_3'(x) \end{pmatrix}_{x=l/2}. \quad (1.7.2.12)$$

После подстановки значений в граничные условия решений соответствующих дифференциальных уравнений находим постоянные интегрирования, при этом в зависимости от четности волновой функции в области 2 получаем различные постоянные интегрирования. Кроме того, в зависимости от четности волновой функции получаем различные уравнения, определяющие условия квантования полной энергии электрона:

для четной волновой функции в области 2

$$a_1 = a_2 \operatorname{tg} \frac{a_2 l}{2},$$

для нечетной волновой функции в области 2

$$a_2 = -a_1 \operatorname{ctg} \frac{a_1 l}{2}.$$

В дальнейшем для анализа будем использовать только четную волновую функцию. В результате проведенных преобразований получаем следующие выражения для волновых функций в областях 1, 2, 3:

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= \psi_0 e^{a_1(x+\frac{l}{2})}, & -\infty \leq x \leq -\frac{l}{2}; \\ \psi_2(x) &= \frac{\psi_0}{\cos \frac{a_2 l}{2}} \cdot \cos a_2 x, & -\frac{l}{2} \leq x \leq \frac{l}{2}; \\ \psi_3(x) &= \psi_0 e^{-a_1(x-\frac{l}{2})}, & \frac{l}{2} \leq x \leq \infty. \end{aligned} \quad (1.7.2.13)$$

Для определения постоянной ψ_0 воспользуемся условием нормировки волновой функции:

$$\int_{-\infty}^{-\frac{l}{2}} e^{2a_1(x+\frac{l}{2})} dx + \int_{-\frac{l}{2}}^{\frac{l}{2}} \frac{\cos^2(a_2 x)}{\cos^2(\frac{a_2 l}{2})} dx + \int_{\frac{l}{2}}^{\infty} e^{-2a_1(x-\frac{l}{2})} dx = \psi_0^{-2}$$

Отсюда имеем:

$$\psi_0^2 = \frac{2}{l} \left(\frac{2}{a_1 l} + 1 + \left(\frac{a_1}{a_2} \right)^2 + \frac{2a_1}{a_2^2 l} \right)^{-1}. \quad (1.7.2.14)$$

Из решений (1.7.2.13) видно: если электрон находится в области 2, то всегда существует некоторая вероятность проникновения вглубь стенки потенциальной ямы, хотя по законам классической физики это невозможно.

Рассмотрим более подробно причину квантования полной энергии электрона, находящегося в потенциальной яме конечной глубины.

Из (1.7.2.8) следует, что величина полной энергии ε электрона в области 2

$$\varepsilon = U + \frac{\eta^2}{2m_e} a_2^2. \quad (1.7.2.15)$$

Следовательно, возможные значения полной энергии определяются возможными значениями параметра a_2 и величиной потенциальной энергии U , причем

$$a_2^2 + a_1^2 = -\frac{2m_e}{\eta^2} U. \quad (1.7.2.16)$$

После подстановки в (1.7.2.16) значений a_1 и a_2 из (1.7.2.8) и последующих преобразований получаем трансцендентное уравнение

$$a_2^2 = -\frac{2m_e}{\hbar^2} U \cos^2\left(\frac{a_2 l}{2}\right). \quad (1.7.2.17)$$

В табл. 2 приведены значения a_2 для различных значений n . Знание корней a_2 позволяет по формуле (1.7.2.15) вычислить полную энергию электрона в потенциальной яме.

С целью определения возможных значений полной энергии электрона в качестве примера, используя (1.7.2.16) и (1.7.2.17), выполним конкретный расчет при следующих исходных условиях: $l = 2$ нм, $U = -10$ эВ. Результаты вычислений представлены в табл. 1.7.2, в которой n – квантовое число.

n	1	2	3	4	5	6	7	8	9
$a_2 \cdot 10^9$	1,48	1,67	4,44	5,03	7,38	8,40	10,3	13,2	15,9
$-\varepsilon$, эВ	9,92	9,89	9,25	9,04	7,92	7,33	$\frac{5,9}{5}$	3,37	0,35

Таблица 1.7.2. Результаты вычислений по (1.7.2.16) и (1.7.2.17)

На рис. 1.7.2.3 изображена потенциальная яма и расположение уровней полной энергии при заданных параметрах a_2 и U . Разумеется, при иных параметрах потенциальной ямы число и расположение уровней полных энергий в ней будет иным. Если глубина потенциальной ямы при заданной ее ширине l невелика, то число уровней в ней ограничено, и электрон в потенциальной яме по-прежнему обладает дискретными значениями полной энергии. Но чем больше ширина потенциальной ямы, тем большее число уровней будет находиться в ней, что непосредственно следует из решений уравнений. Если же провести подобный расчет для макроскопического тела (металла), то окажется, что число уровней в нем станет настолько большим, а энергетический интервал между соседними уровнями будет настолько мал, что отдельные уровни окажутся физически неразличимыми. Таким образом, в металле возникнет зона разрешенных значений энергии. И если она, допустим, частично заполнена, то такая зона разрешенных значений энергии называется зоной проводимости.

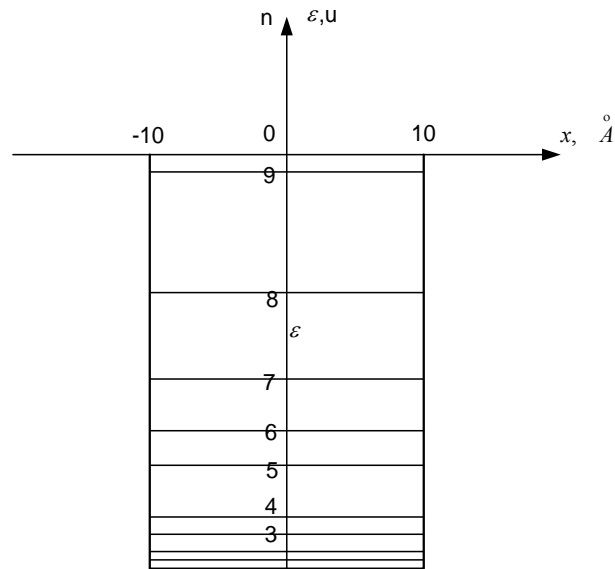


Рис. 1.7.2.3. Потенциальная функция и уровни энергии частицы в потенциальной яме с плоским дном

Итак, чем больше l , тем больше будет квантовых чисел n , тем большее число волновых функций будут описывать движение электронов в потенциальной яме, поскольку каждой волновой функции должно соответствовать собственное значение полной энергии. В нашем примере число волновых функций 9.

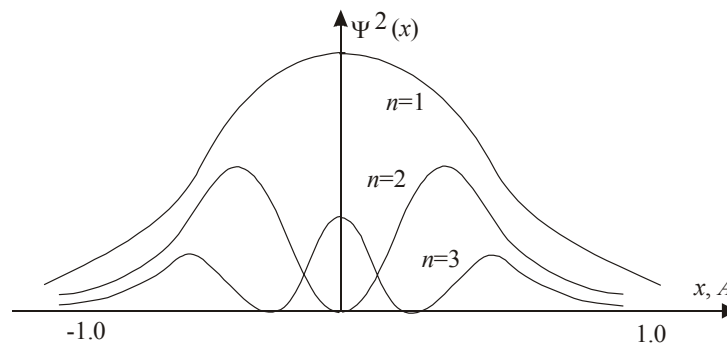


Рис. 1.7.2.4. Графики плотности вероятности для частицы в потенциальной яме

На рис. 1.7.2.4 изображены графики плотности вероятностей для первых трех квантовых чисел. Из рис. 1.7.2.4 видно, что с ростом n понижается высота максимума плотности вероятности, кроме того, число максимумов для заданного n равно числу n . Если ширина потенциальной ямы достаточно велика, то n будет велико, и для электрона, обладающего достаточно большой энергией, число максимумов будет столь велико, что они окажутся физически неразличимыми. Таким образом, в этом случае положение электрона можно определить лишь с точностью до ширины потенциальной ямы. Электрон теперь как бы "размазан" по всей ширине потенциальной ямы.

1.7.3. Движение электрона над потенциальной ямой

Пусть энергия электрона $\varepsilon > 0$. Тогда при движении на его пути не встречается потенциальный барьер (рис. 1.7.3.1).

Классическая механика показывает, что никаких препятствий для движения частицы в прямом направлении не возникает, отражение от потенциального барьера не происходит.

Рассмотрим ту же задачу, применив для ее решения уравнение Шредингера

$$\hat{H}\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}. \quad (1.7.3.1)$$

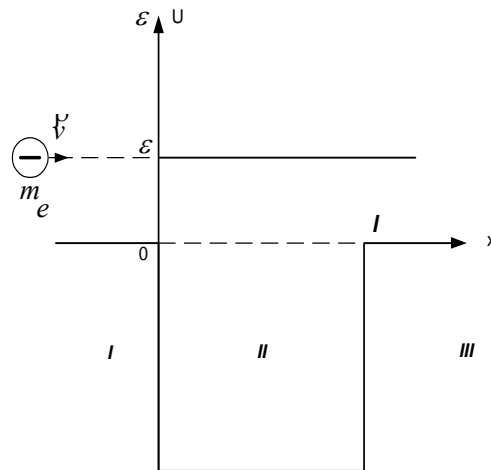


Рис. 1.7.2.5. Схема движения электрона над потенциальной ямой

Его решение представим в виде произведения двух волновых функций:

$$\psi(x, t) = \psi(x) \psi(t), \quad (1.7.3.2)$$

где

$$\psi(t) = \psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon t}.$$

Запишем стационарное уравнение Шредингера

$$\psi''(x) + \frac{2m_e}{\hbar^2} (\varepsilon - U) \psi(x) = 0. \quad (1.7.3.3)$$

Так как всюду полная энергия $\varepsilon > 0$, то решения уравнения (3) будут отличаться от полученных в п. 1.7.2. Как и раньше, все геометрическое пространство разделим на три области.

В областях 1 и 3

$$U = 0, \quad a_1^2 = \frac{2m_e}{\hbar^2} \varepsilon > 0.$$

В области 2

$$U < 0, \quad a_2^2 = \frac{2m_e}{\hbar^2} (\varepsilon - U) > 0.$$

Решениями уравнения (3) будут:

в области 1

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= \psi_{01} e^{ia_1 x} + \psi_{02} e^{-ia_1 x}, \\ \psi_1(x, t) &= \psi_{01} e^{-\frac{i}{\hbar}(\varepsilon t - \hbar a_1 x)} + \psi_{02} e^{-\frac{i}{\hbar}(\varepsilon t + \hbar a_1 x)}; \end{aligned}$$

в области 2

$$\begin{aligned} \psi_2(x) &= \psi_{03} e^{ia_2 x} + \psi_{04} e^{-ia_2 x}, \\ \psi_2(x, t) &= \psi_{03} e^{-\frac{i}{\hbar}(\varepsilon t - \hbar a_2 x)} + \psi_{04} e^{-\frac{i}{\hbar}(\varepsilon t + \hbar a_2 x)}; \end{aligned}$$

в области 3

$$\begin{aligned} \psi_3(x) &= \psi_{05} e^{ia_1 x} + \psi_{06} e^{-ia_1 x}, \\ \psi_3(x, t) &= \psi_{05} e^{-\frac{i}{\hbar}(\varepsilon t - \hbar a_1 x)} + \psi_{06} e^{-\frac{i}{\hbar}(\varepsilon t + \hbar a_1 x)}; \end{aligned}$$

Из полученных решений видно, что каждое из них содержит прямую и отраженную волну. Но так как в области 3 нет физических условий для возникновения отраженной волны при движении электрона в прямом направлении, то естественно положить $\psi_{06} = 0$.

Коэффициенты отражения и прохождения можно выразить через отношения соответствующих значений плотности вероятности:

$$R = \left(\frac{\Psi_{02}}{\Psi_{01}} \right)^2, \quad D = \left(\frac{\Psi_{05}}{\Psi_{01}} \right)^2. \quad (1.7.3.4)$$

Для определения постоянных интегрирования $\Psi_{01}, \Psi_{02}, \Psi_{05}$ используем граничные условия, согласно которым на границе раздела соседних областей пространства должны быть равны не только волновые функции, но и их первые производные:

$$\begin{aligned} \left. \begin{aligned} \Psi_1(x) = \Psi_2(x) \\ \Psi_1'(x) = \Psi_2'(x) \end{aligned} \right\}_{x=0}; \quad \begin{aligned} \Psi_{01} + \Psi_{02} &= \Psi_{03} + \Psi_{04} \\ ia_1(\Psi_{01} - \Psi_{02}) &= ia_2(\Psi_{03} - \Psi_{04}) \end{aligned} \quad (1.7.3.6) \\ \left. \begin{aligned} \Psi_2(x) = \Psi_3(x) \\ \Psi_2'(x) = \Psi_3'(x) \end{aligned} \right\}_{x=l}; \quad \begin{aligned} \Psi_{03}e^{ia_2l} + \Psi_{02}e^{-ia_2l} &= \Psi_{05}e^{ia_2l} \\ ia_2(\Psi_{03}e^{ia_2l} - \Psi_{04}e^{-ia_2l}) &= ia_1\Psi_{05}e^{ia_2l} \end{aligned}$$

Для вычисления R и D необходимо знать $\Psi_{01}, \Psi_{02}, \Psi_{05}$. Их значения можно найти из совместного решения системы уравнений (1.7.3.5):

$$\begin{aligned} \Delta &= 4e^{ia_1l} \left(\cos a_2l - \frac{i(a_1^2 + a_2^2) \sin a_2l}{2a_1a_2} \right) \Psi_{01}, \\ \Delta\Psi_{02} &= \Psi_{01} \frac{2e^{ia_1l}}{a_1a_2} i(a_2^2 - a_1^2) \sin a_2l, \\ \Delta\Psi_{05} &= \Psi_{01} \cdot 4. \end{aligned}$$

Тогда

$$\Psi_{02} = \frac{\Delta\Psi_{02}}{\Delta}, \quad \Psi_{05} = \frac{\Delta\Psi_{05}}{\Delta} \quad (1.7.3.6)$$

где $\Delta, \Delta\Psi_{02}, \Delta\Psi_{05}$ – значения соответствующих определителей системы уравнений.

Значения из (1.7.3.6) подставляем в (1.7.3.4). В результате получаем:

$$R = \frac{\left(\left(\frac{a_2}{a_1} \right)^2 - 1 \right)^2 \sin^2 a_2l}{4 \left(\frac{a_2}{a_1} \right)^2 + \left(\left(\frac{a_2}{a_1} \right)^2 - 1 \right)^2 \sin^2 a_2l}, \quad (1.7.3.7)$$

$$D = \frac{4 \left(\frac{a_2}{a_1} \right)^2}{4 \left(\frac{a_2}{a_1} \right)^2 + \left(\left(\frac{a_2}{a_1} \right)^2 - 1 \right)^2 \sin^2 a_2l}. \quad (1.7.3.8)$$

Из (1.7.3.7) следует, что существует определенная вероятность отражения электрона от правой границы потенциальной ямы, что не имеет места в классической физике. Электрон, пролетая над потенциальной ямой, как бы "чувствует" ее влияние, что и приводит к возникновению некоторой вероятности отражения от нее.

Рассмотрим конкретный пример. Пусть $U = -10$ эВ, $\varepsilon = 5$ эВ, $l = 2$ нм. Расчет, выполненный по формулам (1.7.3.7) и (1.7.3.8), дает следующие результаты:

$$R = 0,22, \quad D = 0,78.$$

Из формулы (1.7.3.7) следует, что при $\sin a_2 l = 0$ коэффициент отражения $R = 0$. Следовательно, условие $a_2 l = \kappa l$ соответствует условию квантования полной энергии электрона:

$$\varepsilon = U + \kappa^2 \frac{\hbar^2}{8m_e l^2}, \quad (1.7.3.9)$$

$$\kappa = 1, 2, 3, \dots$$

Условие (1.7.3.9) накладывает определенные ограничения на величину полной энергии. Если электрон, пролетая над потенциальной ямой, не чувствует ее влияния, $\sin a_2 l = 0$, $R = 0$, то его полная энергия должна быть дискретна, т.е. квантована.

1.7.4. Движение электрона над потенциальным барьером

Пусть на пути движения электрона расположен потенциальный барьер бесконечно большой толщины. Полная энергия электрона всюду больше потенциальной, $\varepsilon > U_0 > 0$ (рис. 1). Рассмотрим влияние такого потенциального барьера на движение электрона. Для этого все пространство разобьем на две области. В области 1 $U = 0$, в области 2 $U = \text{const}$.

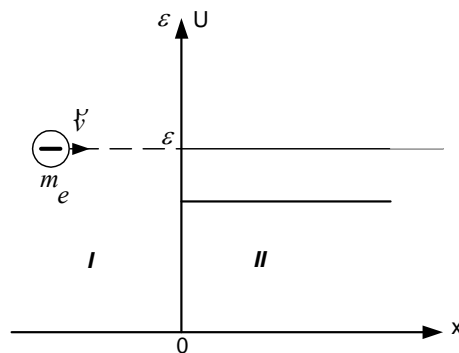


Рис. 1.7.4.1. Схема движения электрона над потенциальным барьером

Для каждой из областей пространства запишем стационарное уравнение Шредингера.

Область 1

$$\psi_1''(x) + a_1^2 \psi_1(x) = 0. \quad (1.7.4.1)$$

Область 2

$$\psi_2''(x) + a_2^2 \psi_2(x) = 0, \quad (1.7.4.2)$$

где

$$a_1^2 = \frac{2m_e}{\hbar^2} \varepsilon, \quad a_2^2 = \frac{2m_e}{\hbar^2} (\varepsilon - U).$$

Решениями дифференциальных уравнений (1.7.4.1) и (1.7.4.2) являются

$$\psi_1(x) = \psi_{01} e^{ia_1 x} + \psi_{02} e^{-ia_1 x}, \quad (1.7.4.3)$$

$$\psi_2(x) = \psi_{03} e^{ia_1 x} + \psi_{04} e^{-ia_1 x}. \quad (1.7.4.4)$$

Тогда с учетом временной составляющей волновой функции получаем:

для области 1

$$\psi_1(x, t) = \psi_{01} e^{-\frac{i}{\hbar}(\varepsilon t - \hbar a_1 x)} + \psi_{02} e^{-\frac{i}{\hbar}(\varepsilon t + \hbar a_1 x)}, \quad (1.7.4.5)$$

$$\psi_1(x, t) = \psi_{1пад}(x, t) + \psi_{1отр}(x, t) \quad .$$

для области 2

$$\psi_2(x, t) = \psi_{03} e^{-\frac{i}{\hbar}(\varepsilon t - \hbar a_2 x)} + \psi_{04} e^{-\frac{i}{\hbar}(\varepsilon t + \hbar a_2 x)}, \quad (1.7.4.6)$$

$$\psi_2(x, t) = \psi_{2пад}(x, t) + \psi_{2отр}(x, t) \quad .$$

где $\psi_{1пад}(x, t)$, $\psi_{2пад}(x, t)$, $\psi_{1отр}(x, t)$, $\psi_{2отр}(x, t)$ – соответственно падающая и отраженная волны де Бройля.

Из постановки задачи следует, что в области 2 отраженная волна возникать не может, поэтому

$$\psi_{2отр}(x, t) = 0, \quad \psi_{04} = 0.$$

Тогда волновая функция в области 2 будет иметь вид:

$$\psi_2(x, t) = \psi_{03} e^{-\frac{i}{\hbar}(\varepsilon t - \hbar a_2 x)}. \quad (1.7.4.7)$$

Для определения постоянных интегрирования ψ_{01} , ψ_{02} , ψ_{03} запишем граничные условия для уравнений (1.7.4.5) и (1.7.4.7)?

$$\left(\begin{array}{l} \psi_1(x) = \psi_2(x) \\ \psi_1'(x) = \psi_2'(x) \end{array} \right)_{x=0} .$$

Тогда после подстановки соответствующих значений в граничные условия имеем:

$$\left. \begin{aligned} \Psi_{01} + \Psi_{02} &= \Psi_{03} \\ a_1 \Psi_{01} - a_2 \Psi_{02} &= a_2 \Psi_{03} \end{aligned} \right\}. \quad (1.7.4.8)$$

Решив систему уравнений (1.7.4.8) совместно, получим

$$\Psi_{02} = \frac{a_1 - a_2}{a_1 + a_2} \Psi_{01}, \quad \Psi_{03} = \frac{2a_1}{a_1 + a_2} \Psi_{01}. \quad (1.7.4.9)$$

При движении в пространстве электрон обладает импульсом $p = \hbar a_{1,2}$. Поэтому

$$p_1 = \hbar a_1, \quad p_2 = \hbar a_2.$$

Так как при движении электрона в пространстве вместе с ним переносится импульс, то плотность вероятности переноса импульса в области 1:

в прямом направлении

$$\omega_{2na\partial} = p_1 \Psi_{01}^2 = \hbar a_1 \Psi_{01}^2,$$

в обратном направлении

$$\omega_{2обp} = p_1 \Psi_{02}^2 = \hbar a_1 \Psi_{02}^2$$

Плотность вероятности переноса импульса в области 2

$$\omega_{2na\partial} = p_1 \Psi_{03}^2 = \hbar a_1 \Psi_{03}^2.$$

По определению, коэффициент отражения электрона от потенциального барьера

$$R = \frac{\omega_{1omp}}{\omega_{2na\partial}} = \left(\frac{\Psi_{02}}{\Psi_{01}} \right)^2, \quad (1.7.5.10)$$

коэффициент прохождения в область 2

$$D = \frac{\omega_{2na\partial}}{\omega_{1na\partial}} = \frac{a_2}{a_1} \left(\frac{\Psi_{03}}{\Psi_{01}} \right)^2. \quad (1.7.5.11)$$

Подставив в (1.7.5.10) и (1.7.5.11) найденные в (1.7.5.9) значения, получим

$$R = \left(\frac{a_2 - a_1}{a_2 + a_1} \right)^2, \quad D = \frac{4a_1 a_2}{(a_2 + a_1)^2}, \quad (1.7.5.12)$$

причем, как видно из (11) и (12),

$$R + D = 1.$$

Рассмотрим конкретный пример. Пусть $\varepsilon = 10$ эВ, $U = 5$ эВ. После вычислений по (1.7.5.12) имеем: $R = 0,0294$, $D = 0,9706$. Если же $\varepsilon = 10$ эВ, $U = 9$ эВ, то $R = 0,270$, $D = 0,730$, т.е. с увеличением высоты потенциального барьера коэффициент отражения возрастает, и при условии $U_0 \geq \varepsilon$ электрон потенциальный барьер преодолеть не может.

В заключение сделаем следующее замечание. В настоящем параграфе рассматривалось движение электрона с использованием плотности вероятности переноса импульса. Этот подход к решению задачи является более общим по сравнению с решениями в разделах 1.7.2 и 1.7.3.

Может возникнуть вопрос: "Почему же в тех разделах был получен физически правильный результат?" Причина заключается в том, что потенциальная энергия электрона в 1-ой и 3-ей областях пространства там была одинаковой, поэтому импульсы электрона в областях 1 и 3 также одинаковы:

$$p_1 = \eta a_1, \quad p_2 = \eta a_2.$$

В результате при вычислении коэффициентов отражения и прохождения импульсы электрона сокращаются. Но если потенциальные энергии в областях 1 и 3 разные, то следует вычислять плотности вероятности переноса импульсов как в прямом, так и в обратном направлениях.

1.7.5. Движение электрона в направлении потенциального барьера конечной толщины

Пусть на пути движения свободного электрона находится потенциальный барьер высотой U конечной толщины l . Полная энергия электрона $\varepsilon < U$ (рис. 1.7.5.1) Как и ранее, все координатное пространство разделим на три области. В областях 1 и 3 потенциальная энергия электрона $U = 0$, в области 2 $U > \varepsilon > 0$.

Вычислим коэффициент отражения электрона R от потенциального барьера и коэффициент прохождения электрона D сквозь потенциальный барьер.

Запишем уравнение Шредингера и их решения для каждой из областей в отдельности.

Область 1:

$$\psi_1'' + a_1^2 \psi_1(x) = 0. \quad (1.7.5.1)$$

Решение дифференциального уравнения

$$\psi_1(x) = \psi_{01} e^{ia_1 x} + \psi_{02} e^{-ia_1 x},$$

$$\psi_1(x, t) = \psi_{01} e^{-\frac{i}{\hbar}(\varepsilon t - \eta a_1 x)} + \psi_{02} e^{-\frac{i}{\hbar}(\varepsilon t + \eta a_1 x)},$$

где

$$a_1^2 = \frac{2m_e}{\hbar^2} \varepsilon > 0.$$

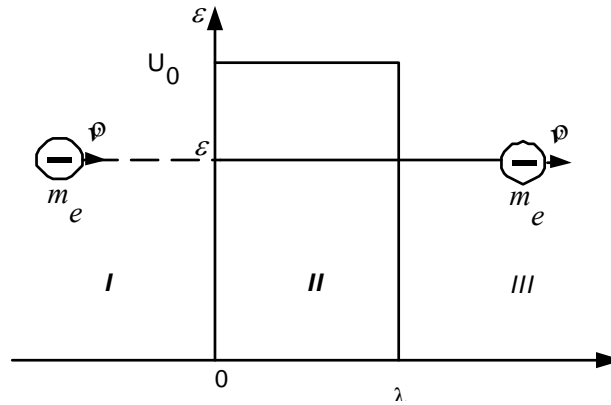


Рис. 1.7.5.1. Схема движения электрона к барьеру конечной ширины

Область 2:

$$\psi_2'' + a_2^2 \psi_2(x) = 0. \quad (1.7.5.2)$$

Решение дифференциального уравнения

$$\psi_2(x) = \psi_{03} e^{ia_2 x} + \psi_{04} e^{-ia_2 x} = \psi_{03} e^{a_3 x} + \psi_{04} e^{-a_3 x},$$

где

$$a_2^2 = \frac{2m_e}{\hbar^2} (\varepsilon - U_0) < 0, \quad a_2 = ia_3, \quad a_3^2 = \frac{2m_e}{\hbar^2} (U - \varepsilon) > 0.$$

Так как ширина потенциального барьера может быть достаточно большой, то при $\psi_{03} \neq 0$ первое слагаемое с ростом x может неограниченно возрастать, что не имеет физического смысла. Для исключения этого противоречия необходимо положить $\psi_{03} = 0$. Тогда решением дифференциального уравнения (1.7.5.2) является

$$\psi_2(x) = \psi_{04} e^{-a_3 x}, \quad (1.7.5.3)$$

$$\psi_2(x, t) = \psi_{04} e^{-\frac{i}{\hbar}(\varepsilon t - i\hbar a_3 x)} = \psi_{04} e^{-\frac{i}{\hbar}(\varepsilon t - i\hbar a_2 x)}.$$

Область 3:

$$\psi_3''(x) + a_1^2 \psi_3(x) = 0.$$

Решение дифференциального уравнения

$$\psi_3(x) = \psi_{05} e^{ia_1 x} + \psi_{06} e^{-ia_1 x},$$

$$\psi_3(x, t) = \psi_{05} e^{-\frac{i}{\hbar}(\varepsilon t - i\hbar a_1 x)} + \psi_{06} e^{-\frac{i}{\hbar}(\varepsilon t + i\hbar a_1 x)}.$$

Поскольку физических условий для отражения электрона в области 3 не существует, то $\psi_{06} = 0$. Тогда

$$\Psi_3(x) = \Psi_{05} e^{ia_1 x}. \quad (1.7.5.4)$$

Для определения амплитуд волновых функций Ψ_{01} , Ψ_{02} , Ψ_{05} используем граничные условия:

$$\left(\begin{array}{l} \Psi_1(x) = \Psi_2(x) \\ \Psi'_1(x) = \Psi'_2(x) \end{array} \right)_{x=0}; \quad \left(\begin{array}{l} \Psi_2(x) = \Psi_3(x) \\ \Psi'_2(x) = \Psi'_3(x) \end{array} \right)_{x=\lambda}$$

Таким образом, формально результаты вычислений в настоящем параграфе полностью совпадают с результатами вычислений в разделе 1.7.3, в котором рассматривалось движение электрона над потенциальной ямой. Различие состоит в том, что в разделе 1.7.3 a_2 – действительная величина, здесь же a_2 – мнимая величина. На основании этого все промежуточные вычисления можно опустить, записав сразу выражения для R и D , полученные в разделе 1.7.3:

$$R = \frac{\left(\left(\frac{a_2}{a_1} \right)^2 - 1 \right)^2 \sin^2 a_2 l}{4 \left(\frac{a_2}{a_1} \right)^2 + \left(\left(\frac{a_2}{a_1} \right)^2 - 1 \right)^2 \sin^2 a_2 l}, \quad (1.7.5.5)$$

$$D = \frac{4 \left(\frac{a_2}{a_1} \right)^2}{4 \left(\frac{a_2}{a_1} \right)^2 + \left(\left(\frac{a_2}{a_1} \right)^2 - 1 \right)^2 \sin^2 a_2 l}. \quad (1.7.5.6)$$

Так как $a_2 = ia_3$ – мнимая величина, то

$$\sin(a_2 l) = \sin(ia_3 l) = \text{sh}(a_3 l) = \frac{e^{a_3 l} - e^{-a_3 l}}{2}.$$

Найденное выражение для подставим в (1.7.5.5) и (1.7.5.6):

$$R = \frac{\left(\left(\frac{a_3}{a_1} \right)^2 - 1 \right)^2 \text{sh}^2(a_3 l)}{4 \left(\frac{a_3}{a_1} \right)^2 + \left(\left(\frac{a_3}{a_1} \right)^2 - 1 \right)^2 \text{sh}^2(a_3 l)}, \quad (1.7.5.7)$$

$$D = \frac{4\left(\frac{a_2}{a_1}\right)^2}{4\left(\frac{a_2}{a_1}\right)^2 + \left(\left(\frac{a_2}{a_1}\right)^2 - 1\right)^2 \operatorname{sh}^2 a_2 l} \cdot \quad (1.7.5.8)$$

Выражение для коэффициента прохождения электрона через барьер может быть представлено в виде

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{2}{\eta} \sqrt{2m_e(U_0 - \varepsilon)} \cdot l\right)$$

где величина D_0 близка к единице. При этом $R=1-D$.

Из физического смысла формул (1.7.5.7) и (1.7.5.8) следует, что здесь отсутствуют условия квантования, причина состоит в том, что $\operatorname{sh}(a_2 l)$ не является периодической функцией. Следовательно, при любых значениях ε , U , l имеется определенная вероятность для электрона преодолеть потенциальный барьер без изменения полной энергии; электрон, сталкиваясь с потенциальным барьером, с определенной вероятностью может пройти через него как через туннель. Поэтому это явление, этот эффект еще называется туннельным эффектом. Опыт подтверждает предсказание теории.

Оценим теперь вероятность туннельного эффекта для слоев различной толщины. Расчет выполним для $U = 5$ эВ и двух значений полной энергии: 3 эВ и 4, 8 эВ. Результаты вычислений по формулам (1.7.5.7) и (1.7.5.8) сведены в табл. 1.7.3.

ε , эВ	R				D			
	l , А				l , А			
	0,1	0,2	0,3	0,4	0,1	0,2	0,3	0,4
3	0,395	0,810	0,952	0,989	0,605	0,190	0,048	0,011
4,8	0,259	0,596	0,783	0,879	0,741	0,404	0,217	0,121

Таблица 1.7.3. Вероятность туннельного эффекта для слоев различной толщины

Как следует из табл. 1.7.3, туннельный эффект может проявляться лишь на расстояниях, сравнимых с размерами атомов. В последние годы туннельный эффект неожиданно нашел практическое применение: на основе использования этого эффекта были разработаны и успешно применяются туннельные микроскопы, с помощью которых

можно исследовать и визуализировать изучаемую поверхность на атомно-молекулярном уровне. Для этого используется микроскопический зонд, который перемещается вдоль поверхности в непосредственной близости от нее. Регистрируемый сигнал усиливается, и на экране осциллографа или телевизора наблюдается профиль изучаемой поверхности, что, в свою очередь, является экспериментальным доказательством существования этого эффекта.

На основе использования представлений о туннельном эффекте объясняются некоторые физические явления, такие как автоэлектронная эмиссия или α -распад. При помощи туннельного эффекта можно объяснить принцип работы туннельных диодов и других тонкопленочных элементов, разработанных в начале 60-х годов. Эти элементы в настоящее время промышленностью выпускаются серийно. Наконец, с помощью туннельного эффекта можно объяснить механизм проводимости тонких диспергированных пленок, ибо в очень тонких пленках толщиной в моноатомный слой механизм проводимости иной, нежели в массивном образце: там не выполняется закон Ома и наблюдается ряд особенностей, вызванных тем, что средняя длина свободного пробега электрона сравнима с расстоянием между отдельными атомными образованиями (кластерами), существующими на поверхности твердого тела.

1.7.6. Автоэлектронная эмиссия

Возможность прохождения электрона или другой микрочастицы (нуклон в ядре атома, α -частица) через потенциальный барьер конечной толщины впервые получила экспериментальное подтверждение в явлении эмиссии электронов из металлов, возникающей под действием внешнего электрического поля. Это явление называется автоэлектронной эмиссией.

Сущность явления следующая. Действие внешнего электрического поля напряженностью E приводит к тому, что на границе металл–вакуум возникает потенциальный барьер конечной толщины вместо существовавшего ранее потенциального барьера бесконечно большой толщины. Этот барьер в сильных полях оказывается достаточно тонким, и электрон за счет туннельного эффекта может вылететь за пределы металла. В результате эмиссия электронов начинается при значительно меньших значениях напряженности электрического поля E по сравнению с классической оценкой явления. Так как эта эмиссия электронов возникает при любой температуре, в том числе и комнатной, то явление называется холодной эмиссией электронов.

Внешнее электрическое поле в металл практически не проникает, оно лишь действует на электроны поверхностного слоя, на пути движения которых теперь расположен достаточно узкий потенциальный барьер. Поэтому имеется определенная вероятность преодолеть такой потенциальный барьер туннельным эффектом.

В настоящее время явление автоэлектронной эмиссии нашло практическое применение. В частности, оно используется в электронных проекторах, у которых увеличение изображения объекта достигает величины $2 \cdot 10^6$. При таком увеличении изображения отдельных участков поверхности острия вольфрамового катода получают такой величины, что можно отчетливо наблюдать на экране проектора поверхность кристаллической решетки, а также отдельные поверхностные атомные скопления – кластеры.

Для получения большой величины напряженности электрического поля вблизи поверхности катода он должен быть очень тонким, радиус кривизны поверхности катода должен быть порядка 1 мкм. Только в этом случае можно получить сильное электрическое поле вблизи поверхности катода (рис. 1.7.6.1).

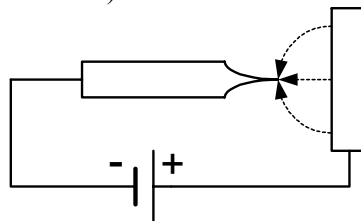


Рис. 1.7.6.1. Схема применения игольчатого катода

Явление автоэлектронной эмиссии нашло широкое применение в промышленности. Речь идет о следующем. В 70-х–90-х гг. XX века на основе использования явления автоэлектронной эмиссии были разработаны катоды для целого ряда электронно-лучевых приборов. Использование таких катодов позволило резко увеличить ток эмиссии электронов, сделать сильноточные установки более надежными и компактными. Сильное электрическое поле позволяет туннельным эффектом вырывать электроны не только с поверхности металла и жидкости, но и из отдельных атомов и молекул. Это явление называется автоионизацией. В настоящее время явление автоионизации используется в ионных источниках масс-спектрометров. Достоинством таких источников является отсутствие у них накаливаемых электродов, а также отсутствие диссоциации анализируемых молекул.