

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ  
И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
Федеральное государственное бюджетное образовательное  
учреждение высшего образования  
«ПЕРМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ  
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»

**В. К. Хеннер, К. Б. Циберкин, П. В. Краузин**

## **КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ ОДНОМЕРНЫЕ ЗАДАЧИ**

*Допущено методическим советом Пермского  
государственного национального исследовательского университета  
в качестве учебно-методического пособия для студентов, обучающихся  
по направлениям подготовки бакалавров «Физика»,  
«Прикладные математика и физика», «Нанотехнологии и  
микросистемная техника», «Техническая физика»*



Пермь 2018

УДК 530.145

ББК 22.314

X383

**Хеннер В.К., Циберкин К.Б., Краузин П.В.**

X383 Квантовая теория: одномерные задачи: учебное пособие / В.К. Хеннер, К.Б. Циберкин, П.В. Краузин; Перм. гос. нац. исслед. ун-т. – Пермь, 2018. – 124 с.

**ISBN 978-5-7944-3188-9**

В учебном пособии излагаются основания и фундаментальные понятия квантовой механики. В рамках картины Шрёдингера на базе одномерных задач описано формирование энергетических спектров частиц в потенциальных ямах, туннельный эффект и рассеяние частиц, дано описание квантового гармонического осциллятора, при нулевом значении момента импульса описаны энергетические спектры и волновые функции частиц в сферических потенциалах: потенциальной яме и водородоподобном атоме. Рассмотрено применение модельных задач к описанию конкретных физических проблем: альфа-распада, автоэлектронной эмиссии, электрической проводимости твёрдых тел.

Предназначено для студентов, обучающихся по направлениям подготовки бакалавров «Физика», «Прикладная математика и физика», «Нанотехнологии и микросистемная техника», «Техническая физика».

**УДК 530.145**

**ББК 22.314**

*Печатается по решению редакционно-издательского совета*

*Пермского государственного национального исследовательского университета*

*Рецензенты:* лаборатория физической гидродинамики ИМСС УрО РАН (зав. лабораторией – д. ф.-м. н., профессор **П.Г. Фрик**); доцент кафедры Общей физика (ОФ) ПНИПУ, к. ф.-м. н. **И.С. Файзрахманова**

**ISBN 978-5-7944-3188-9**

© Хеннер В.К., Циберкин К. Б.,  
Краузин П.В., 2018

© Пермский государственный национальный  
исследовательский университет, 2018

## ОГЛАВЛЕНИЕ

<b>1. ВВЕДЕНИЕ. ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ</b> .....	<b>4</b>
1.1. Квантовые свойства электромагнитного излучения .....	4
1.2. Дискретность энерггических состояний атомов .....	9
1.3. Волновые свойства частиц.....	14
1.4. Волновой пакет, фазовая и групповая скорости.....	20
<b>2. ВОЛНОВАЯ ФУНКЦИЯ</b> .....	<b>24</b>
2.1. Уравнение Шрёдингера.....	24
2.2. Вероятностная интерпретация волновой функции .....	27
2.3. Уравнение непрерывности.....	30
<b>3. ОДНОМЕРНЫЕ ЗАДАЧИ</b> .....	<b>32</b>
3.1. Общие свойства одномерного движения .....	32
3.2. Бесконечно глубокая прямоугольная потенциальная яма	34
3.3. Прямоугольная потенциальная яма конечной глубины.	41
3.4. Рассеяние на барьере .....	44
3.5. Туннельный эффект. Эффект Рамзауэра .....	48
3.6. Рассеяние на потенциальной яме .....	59
3.7. Барьер произвольной формы. Коэффициент Гамова .....	61
3.8. Альфа-распад .....	62
3.9. Холодная эмиссия электронов из металла .....	65
3.10. Периодический потенциал. Энергетические зоны. Зонная теория .....	70
<b>4. КВАНТОВЫЙ ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР</b> ....	<b>80</b>
4.1. Частица в параболическом потенциале. Полиномы Эрмита.....	80
<b>5. СФЕРИЧЕСКИ-СИММЕТРИЧНЫЕ ПОТЕНЦИАЛЫ</b> .....	<b>91</b>
5.1. Уравнение Шрёдингера в сферических координатах ....	91
5.2. Сферическая потенциальная яма .....	99
5.3. Уровни энергии водородоподобного атома .....	103
5.4. Радиальная волновая функция водородоподобного атома.....	108
<b>6. ЗАДАЧИ И УПРАЖНЕНИЯ</b> .....	<b>113</b>
<b>СПИСОК РЕКОМЕНДУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ</b> .....	<b>123</b>

# 1. ВВЕДЕНИЕ. ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

## 1.1. Квантовые свойства электромагнитного излучения

Для иллюстрации квантовых свойств электромагнитного излучения рассмотрим фотоэффект и эффект Комптона.

*Фотоэлектрический эффект* – это выбивание электронов из металлов под действием света. Он был открыт Генрихом Герцем в 1887 г., схема экспериментальной установки изображена на рис. 1, а. При облучении светом катода ( $V = V_K - V_A < 0$ ) наблюдается фототок  $i$ , но ясно, что при смене полярности,  $V > 0$ , если задерживающий потенциал  $V = V_0$  будет достаточным, он не даст электронам достичь противоположного электрода. Изучалась зависимость фототока  $i = i(I, \omega)$  от интенсивности падающего света  $I$  и его частоты  $\omega$ .

Согласно классической теории кинетическая энергия фотоэлектрона связана с частотой падающей волны как  $T \sim \omega^{-2}$ . Действительно, уравнение движения электрона под действием переменного электрического поля имеет вид:

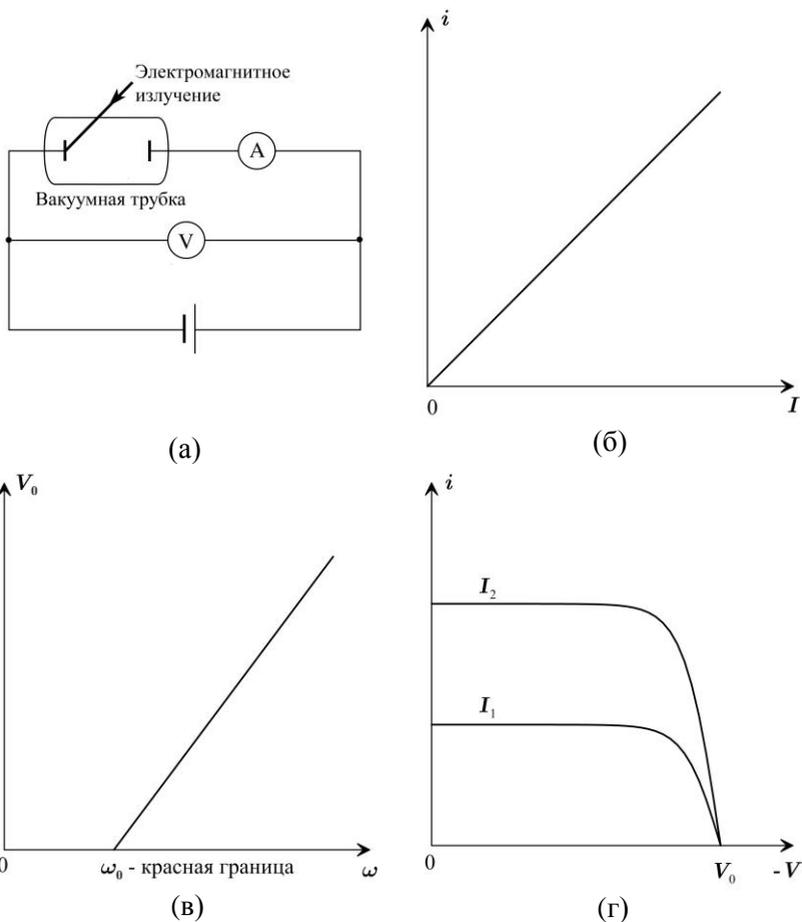
$$m\dot{v} = eE \cos \omega t,$$

тогда импульс электрона и его кинетическая энергия определяются соотношениями

$$mv = \frac{1}{\omega} eE \sin \omega t, \quad T = \frac{mv^2}{2} \sim \frac{1}{\omega^2}.$$

Однако в экспериментах выяснилось, что фототок пропорционален интенсивности падающего света (самых фотоэлектронов тем больше, чем больше  $I$ ), а кинетическая энергия фотоэлектронов (она может быть измерена по запирающему потенциалу,  $V_0 = T / e$ ) ведёт себя как  $T \sim \omega$  (рис. 1, б). В экспериментах также выяснилось, что существует минимальная величина  $\omega_0$ , при которой фототок прекращается – так называемая красная граница фотоэффекта (рис. 1, в). Кроме того, оказалось, что кинетическая энергия фотоэлектронов не зависит от интенсивности падающего света (рис. 1, г), хотя в классической картине, очевидно, энергия  $T$  пропорциональна  $I$ . Для объяснения

всех этих результатов Альберт Эйнштейн, опираясь на *гипотезу Планка* о существовании квантов излучения, в 1905 г. предложил рассматривать свет не как волну, а как поток фотонов с энергией  $E = \hbar\omega$ , где  $\hbar \approx 1.06 \cdot 10^{-27}$  эрг·с.



**Рис. 1. Фотоэффект:** а) – схема экспериментальной установки; б) – зависимость фототока от интенсивности падающего света; в) – зависимость запирающего потенциала от частоты падающего света; г) – зависимость фототока от ускоряющего напряжения

Тогда, считая, что один фотон сталкивается с одним электроном, кинетическая энергия фотоэлектрона

$$T = \hbar\omega - A_{\text{вых}} \quad (1.1)$$

и таким образом не зависит от интенсивности облучения.

Оценим частоту  $\nu_0$  при работе выхода  $A_{\text{вых}} = 2$  эВ ( $1 \text{ эВ} \approx 1.6 \cdot 10^{-12}$  эрг), что близко к её минимальному значению в металлах:

$$\nu_0 = \frac{\omega_0}{2\pi} = \frac{A}{2\pi\hbar} \approx 0.5 \cdot 10^{15} \text{ Гц}.$$

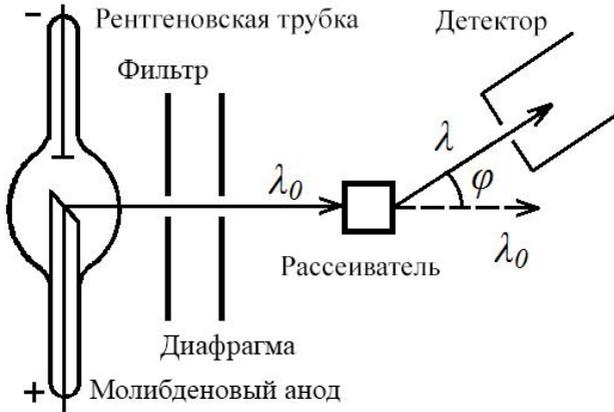
Соответствующая длина волны  $\lambda_0 = c / \nu_0 \approx 6 \cdot 10^{-5} \text{ см} = 600 \text{ нм}$ , что соответствует видимому диапазону (оранжевый свет).

Ясно, что в классической оптике кванты света невозможно наблюдать из-за их колоссального количества в световой волне. *Упражнение:* оцените их число, излучаемое лампой мощностью 100 ватт в течение секунды (ответ:  $\approx 3 \cdot 10^{20}$ ).

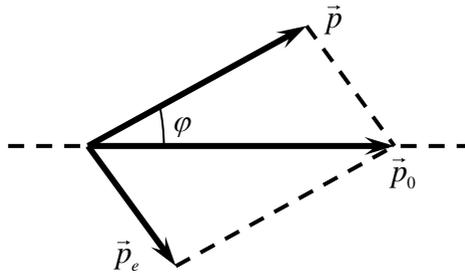
*Эффект Комптона* состоит в изменении частоты рентгеновского излучения при рассеянии. Схема установки Комптона (1923 г.) изображена на рис. 2. Рентгеновское излучение создавалось бомбардировкой электронами молибденового анода. С помощью фильтра и диафрагмы создавался относительно узкий луч, соответствующий характеристической линии рентгеновского спектра молибдена с энергией фотонов 17 кэВ (*Упражнение:* оцените длину волны такого излучения). Мишенью в оригинальной работе Комптона был кристалл графита; аналогичные результаты могут быть получены и на металлической фольге. Найденное в эксперименте изменение длины волны после рассеяния описывается формулой

$$\lambda - \lambda_0 = \Delta\lambda = 2\pi\lambda_c (1 - \cos\varphi), \quad (1.2)$$

где  $\lambda_c \approx 3.86 \cdot 10^{-11} \text{ см}$  – постоянная Комптона, не зависящая от материала мишени (следовательно, рассеяние происходит на свободных электронах мишени).



**Рис. 2. Схема эксперимента Комптона**



**Рис. 3. Разложение импульса падающего фотона на импульсы электрона отдачи  $p_0$  и рассеянного фотона  $p$**

Объяснение эффекта можно получить, рассматривая электромагнитную волну как поток фотонов и изучая столкновение одного фотона с одним электроном (рис. 3). Сохранения импульса дает

$$\vec{p}_0 = \vec{p} + \vec{p}_e.$$

Для импульса электрона отдачи следует использовать релятивистскую формулу, поскольку энергия рентгеновского фотона сопоставима с энергией покоя электрона ( $\hbar\omega \sim mc^2$ ):

$$E^2 = (mc^2)^2 + (\vec{p}c)^2. \quad (1.3)$$

Масса покоя фотона  $m = 0$ , т.е. импульс фотона

$$p = \frac{E}{c} = \frac{\hbar\omega}{c}. \quad (1.4)$$

Тогда

$$\vec{p}_e^2 = (\vec{p}_0 - \vec{p})^2 = \left(\frac{\hbar\omega_0}{c}\right)^2 + \left(\frac{\hbar\omega}{c}\right)^2 - \frac{2\hbar^2\omega\omega_0}{c^2}\cos\varphi.$$

Запишем закон сохранения энергии, пренебрегая кинетической энергией теплового движения электронов в металле:

$$\hbar\omega_0 + mc^2 = \hbar\omega + \sqrt{m^2c^4 + p_e^2c^2}.$$

Из этих соотношений имеем (удобно приравнять  $c^2\vec{p}_e^2$  из каждой формулы):

$$\omega = \omega_0 \frac{mc^2}{mc^2 + \hbar\omega_0(1 - \cos\varphi)}. \quad (1.5)$$

Для  $\hbar\omega_0 \ll mc^2$  частота  $\omega \approx \omega_0$ . *Упражнение:* получите оценки  $\omega / \omega_0$  для оптического диапазона (600 нм), мягкого (10 нм) и жёсткого (0.1 нм) рентгеновского излучения и угла рассеяния  $\varphi = \pi / 2$ .

Учитывая связь частоты и длины волны фотона

$$\omega = \frac{2\pi c}{\lambda},$$

получим

$$\lambda - \lambda_0 = \frac{2\pi\hbar}{mc}(1 - \cos\varphi), \quad (1.6)$$

откуда приходим к выражению для комптоновской длины волны через фундаментальные постоянные и массу электрона:

$$\lambda_C = \hbar/mc.$$

Для электронов  $mc^2 \approx 0.511$  МэВ, и получаем значение  $\lambda_C \approx 3.86 \cdot 10^{-11}$  см.

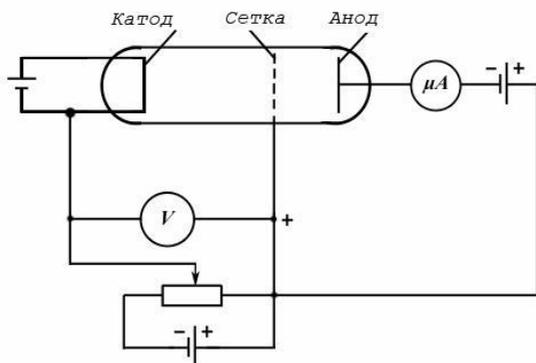
Эти два эксперимента наиболее убедительно продемонстрировали реальность квантов электромагнитного излучения. Заметим, что в квантовых задачах удобно оперировать значениями энергии, измеренными в электрон-вольтах (эВ), размерами – в ангстремах (Å): для справки,  $1 \text{ эВ} \approx 1.60 \cdot 10^{-12} \text{ эрг} = 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}$ ;  $1 \text{ Å} = 10^{-8} \text{ см} = 10^{-10} \text{ м}$ . Массы частиц в энергетических единицах: для электрона  $mc^2 \approx 0.511 \text{ МэВ}$ , для протона  $m_p c^2 \approx 938.27 \text{ МэВ}$ , нейтрона –  $m_n c^2 \approx 939.56 \text{ МэВ}$ . Заряд электрона  $1.6 \cdot 10^{-19} \text{ Кл} = 4.8 \cdot 10^{-10} \text{ ед. СГСЭ}$ .

## 1.2. Дискретность энергетических состояний атомов

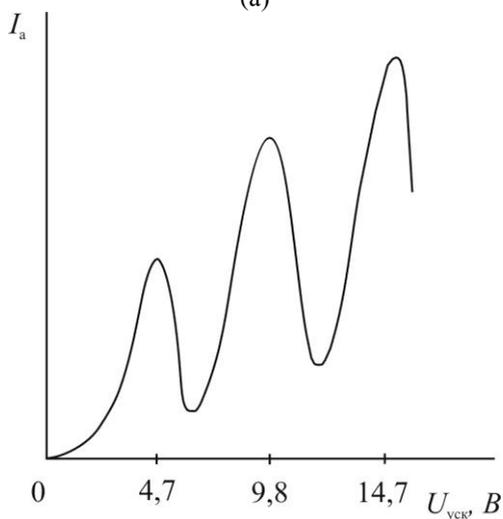
В 1913 г. Джеймс Франк и Густав Герц предприняли попытку измерения потенциалов ионизации атомов веществ, находящихся в газообразном состоянии. Через него пропускался поток электронов, ускоренных электрическим полем. Схема экспериментальной установки представлена на рис. 4, а.

Стеклянная трубка заполняется парами исследуемого вещества под малым давлением. Электроны, вылетев из катода, ускоряются разностью потенциалов, приложенной между ним и сеткой. За ней находится электрод-коллектор, на который подан небольшой задерживающий потенциал (около  $-0.5 \text{ В}$ ). Электроны могут пройти на коллектор через вещество и сетку, если их энергия достаточна для преодоления задерживающего потенциала, и вызвать электрический ток в цепи коллектора, измеряемый гальванометром.

Когда в сосуде поддерживается вакуум, то при малых ускоряющих напряжениях ток коллектора растёт по закону  $I \sim V^{3/2}$ , а при больших – выходит на насыщение и перестает зависеть от приложенного напряжения. Однако в эксперименте с сосудом, заполненным газом, наблюдается совершенно другая вольт-амперная характеристика – на ней появляются чёткие минимумы и максимумы. Для паров ртути характерное расстояние между соседними минимумами (или максимумами) равно  $4.9 \text{ В}$  (рис. 4, б).



(а)



(б)

**Рис. 4. Эксперимент Франка–Герца: а) – схема установки, б) – вольт-амперная характеристика вакуумной трубки, заполненной парами ртути**

Полученный в эксперименте результат объясняется дискретностью энергетических уровней атомов. Электроны, проходя через газ, могут взаимодействовать с атомами упруго или неупруго. При упругих столкновениях состояние атома не изменяется, а электроны отражаются от них, как от неподвижной стенки. Когда кинетическая энергия электрона достигает 4,9 эВ,

то её часть тратится на возбуждение атома ртути – электрон передаёт свою энергию электронной оболочке атома. В результате столкновения становятся неупругими. И если начальная кинетическая энергия электрона близка к 4.9 эВ, то он, отдав её, не может преодолеть задерживающий потенциал коллектора. В результате ток в цепи резко падает, что и соответствует первому минимуму вольт-амперной характеристики. Последующие минимумы, отвечают ситуации, когда электрон, передав кинетическую энергию атому, вновь успевает ускориться до энергии, достаточной для возбуждения другого атома.

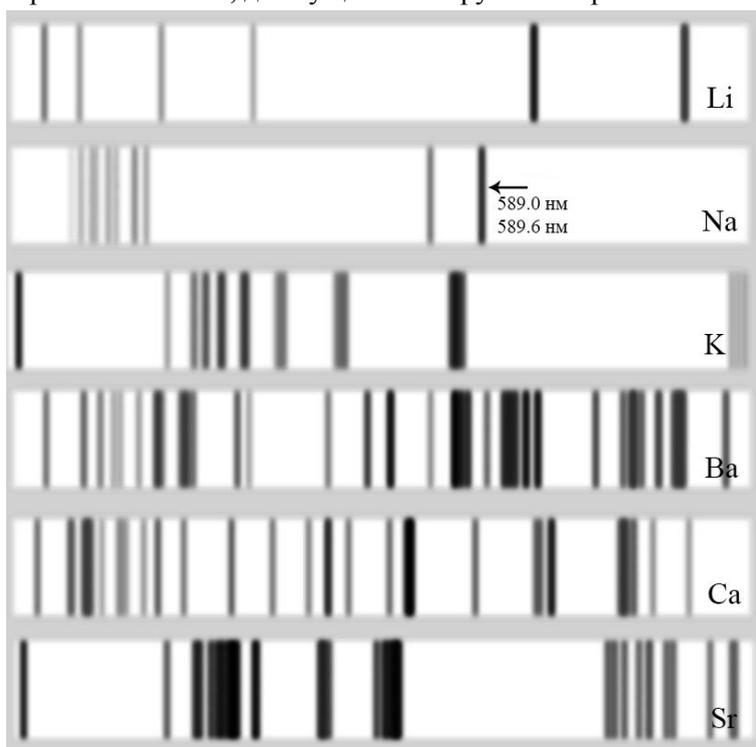
Кроме того, при достижении минимумов вольт-амперной характеристики наблюдается свечение газа, заключённого в трубку. В частности, для ртути возникает ультрафиолетовое излучение с длиной волны около 253.7 нм. Это связано с переходами возбуждённых атомов из состояния с высокой энергией в основное. При этом избыток энергии сбрасывается в виде фотонов, частота которых определяется разностью энергетических уровней атомов:

$$E_m - E_n = \hbar\omega. \quad (1.7)$$

Другим явлением, связанным с дискретностью энергетических спектров, является *резонансное излучение* атомов, продемонстрированное Робертом Вудом в 1904–1905 гг. на примере натрия. В оптическом спектре излучения натрия имеется характерная пара близких и ярких жёлтых линий с длинами волн 589.0 и 589.6 нм (т.н. «дублет натрия»). При освещении паров натрия сфокусированным пучком, они начинают ярко светиться вдоль линии распространения падающего излучения. Возникающий свет распространяется равномерно во все стороны. Тот же эффект наблюдается, если освещать пары ртути ультрафиолетовым излучением с длиной волны 253.7 нм. В этом случае атомы газа возбуждаются фотонами, энергия которых равна разности состояний между энергетическими уровнями.

Опыты Франка–Герца дали прямое подтверждение сформулированным в том же 1913 г. *постулатам Нильса Бора* о строении атомов. Для объяснения хорошо известной к тому времени линейчатой структуры оптических спектров излучения

различных химических элементов (рис. 5) он работал с планетарной моделью атома Резерфорда, рассматривая электроны как материальные точки, движущиеся по круговым орбитам.



**Рис. 5. Линейчатые спектры излучения некоторых химических элементов (сверху вниз): литий, натрий, калий, барий, кальций, стронций; стрелкой отмечен дублет натрия**

Чтобы преодолеть противоречия этой модели с классической электродинамикой Максвелла, согласно которой атомы неустойчивы – электрон на круговой орбите непрерывно излучает энергию и поэтому должен быстро упасть на ядро – Бор принял гипотезу Планка о квантовании электромагнитного излучения и предложил следующие допущения:

- атом и атомная система может находиться не в произвольных состояниях, а только в некоторых стационарных состояниях, характеризующихся определёнными

значениями энергии. В этих состояниях атом не теряет энергию (не излучает) и может находиться в стационарном состоянии сколь угодно долго;

- при переходе из стационарного состояния с большей энергией  $E_m$  в состояние с меньшей энергией  $E_n$  излучается один фотон с энергией, определяемой формулой (1.7).

Соотношение (1.7) называется *правилом частот Бора*.

Постулаты Бора дали первое теоретическое объяснение атомных спектров и серий спектральных линий для водорода. Помимо этого, теория Бора позволила определить характерные размеры атомов. Боровский радиус – радиус орбиты, соответствующей наименьшей энергии электрона в атоме водорода – определяется формулой

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} \approx 0.529 \text{ \AA}. \quad (1.8)$$

В целом, результаты теории Бора подготовили почву для разработки принципиально новых положений физики микромира и послужили эффективным средством для интерпретации накопленных к моменту её создания экспериментальных данных в области спектроскопии.

Однако, помимо всех своих успехов, эта теория имеет ряд принципиальных недостатков и внутренних противоречий. Прежде всего, теория Бора оказалась совершенно неприменимой к многоэлектронным атомам. Она позволила вычислить частоты спектральных линий, но не дала обоснованного объяснения их интенсивности и поляризации. Наконец, наиболее фундаментальное противоречие связано именно с введением постулата о существовании стационарных состояний атомов. Описание движения электрона в этих состояниях производится посредством классической механики, но противоречит классической электродинамике. Таким образом, теорию Бора следует рассматривать как промежуточный шаг на пути построения более совершенной, последовательной и обоснованной квантовой механики.

### 1.3. Волновые свойства частиц

В 1924 г. Луи де Бройль выдвинул гипотезу, согласно которой с движущейся частицей связана некая волна, т.е. всем частицам присущи волновые свойства. Он исходил из соотношения между энергией и импульсом, справедливого для фотонов ( $m = 0$ ),  $E = pc$ , т.е. импульс волны (фотона) равен

$$p = \frac{E}{c} = \frac{\hbar\omega}{c}. \quad (1.9)$$

С учётом соотношения между частотой и длиной волны

$$\frac{\omega}{c} = \frac{2\pi\nu}{c} = \frac{2\pi}{\lambda} = k, \quad (1.10)$$

где  $k$  – волновое число, получаем  $p = \hbar k$  (в векторной форме:  $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ ). Де Бройль предположил, что эта формула справедлива и для частиц с ненулевой массой. Тогда частице с импульсом  $p$  соответствует некая волна длиной  $\lambda = 2\pi/k = 2\pi\hbar/p$  и частотой  $\omega = E/\hbar$ .

Таким образом, в основе квантовой механики лежат соотношения:

$$E = \hbar\omega, \quad (1.11)$$

$$\vec{p} = \hbar\vec{k}. \quad (1.12)$$

$E$  и  $\vec{p}$  отражают корпускулярные свойства, а  $\omega$  и  $\vec{k}$  – волновые.

Для нерелятивистской частицы

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{2\pi\hbar}{mv}.$$

Например, для электрона со скоростью  $10^9$  см/с, длина волны составит

$$\lambda = \frac{2 \cdot 3.14 \cdot 1.06 \cdot 10^{-27} \text{ эрг} \cdot \text{с}}{9.1 \cdot 10^{-28} \text{ г} \cdot 10^9 \text{ см/с}} \approx 10^{-8} \text{ см} \approx 1 \text{ \AA}.$$

Полученный результат можно интерпретировать следующим образом: при такой скорости электрон проявляет волновые свойства, которые существенны при взаимодействии с объектами размером порядка ангстрема.

Если скорость электрона приближается к скорости света ( $3 \cdot 10^{10}$  см/с), становятся заметными эффекты специальной теории относительности. В таком случае формула для длины волны модифицируется:

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{2\pi\hbar}{m\gamma v}, \quad \gamma = \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{-1/2}.$$

Рассмотрим ещё один пример – оценим длину волны де Бройля для броуновской частицы  $m \approx 10^{-12}$  г, находящейся в термодинамическом равновесии при  $20^\circ\text{C}$ :

$$E = \frac{3}{2}kT,$$

где  $k = 1.38 \cdot 10^{-16}$  эрг/К =  $1.38 \cdot 10^{-23}$  Дж/К – постоянная Больцмана. Получаем:

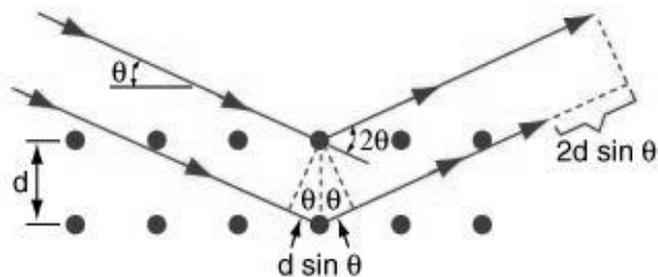
$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{3mkT}} \approx 1.9 \cdot 10^{-6} \text{ \AA}.$$

Это очень маленькая величина, т.е. даже такие мелкие частицы, как броуновские, могут рассматриваться как классические. *Упражнение:* оцените длину волны де Бройля тепловых нейтронов с кинетической энергией броуновского движения, соответствующей комнатной температуре (примерно  $0.025$  эВ).

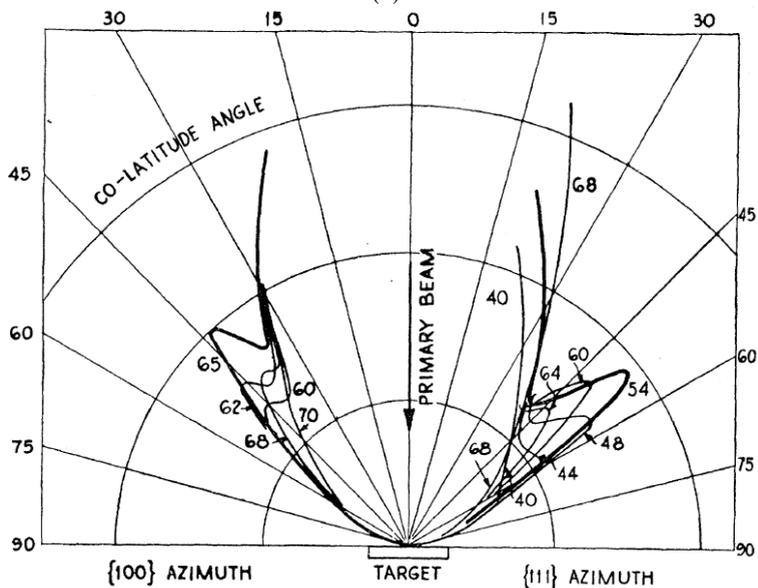
Длина волны де Бройля является критерием, определяющим, классическим или квантовым законам подчиняется конкретная система. Именно, если характерный линейный размер системы  $L$ , и длина волны  $\lambda \ll L$ , то система с высокой точностью описывается как классическая. Если же длина волны соизмерима с размером системы ( $\lambda \geq L$ ), то необходимо использовать квантово-механическое описание.

Впервые экспериментальное подтверждение волновых свойств частиц было получено Клинтонем Дэвиссоном и Лесте-

ром Джермером в 1927 г. при изучении рассеяния электронов, ускоряемых «электронной пушкой», на монокристаллах (в оригинальной работе использован никель). В их эксперименте была обнаружена существенная угловая зависимость интенсивности рассеяния, характерная для дифракционной решётки. Положение максимума изменяется также при изменении ускоряющего напряжения, и, соответственно - импульса и длины волны де Бройля для электронов.



(a)



(б)

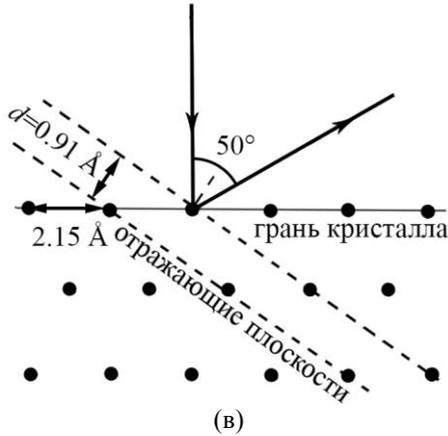


Рис. 6. Опыт Дэвиссона–Джермера: а) – схема возникновения интерференции на кристалле; б) – интенсивность рассеяния в зависимости от направления при различных ускоряющих напряжениях (указаны возле кривых)<sup>1</sup>; в) – формирование рассеянного луча

Максимумы подчиняются установленному в 1929 г. *условию Вульфа–Брэгга*:

$$2d \sin \theta = n\lambda, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

где  $d$  – расстояние между атомными плоскостями в кристалле. Эта зависимость справедлива также для рассеяния на кристаллах рентгеновских лучей, протонов, нейтронов и других частиц, длина волны де Бройля которых соизмерима с межплоскостными расстояниями кристаллической решётки (рис. 6, а).

В частности, в одном из экспериментов для никеля при ускоряющем напряжении 54 В, регистрируется один максимум рассеяния, а угол между падающим и рассеянным лучами составляет  $50^\circ$ , падающий луч при этом перпендикулярен плоскости образца (рис. 6, б). Из законов геометрической оптики следует, что отражающие атомные плоскости внутри образца наклонены под углом  $25^\circ$  к его поверхности, и угол скольжения луча к отражающей плоскости решётки равен  $\theta = 65^\circ$  (рис. 6, в). Постоянная решётки никеля равна  $2.15 \text{ \AA}$ , а расстояние между

<sup>1</sup> Davisson C. J., Germer L. H. Diffraction of electrons by a crystal of nickel. *Physical Review*. 1927, V. 30 (6), pp.705–740.

отражающими плоскостями в этом случае равно  $0.91 \text{ \AA}$ , и поэтому максимум соответствует длине волны

$$\lambda = 2d \sin 65^\circ \approx 1.66 \text{ \AA}.$$

Длина волны де Бройля электрона с кинетической энергией  $54 \text{ эВ}$  равна

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_e E}} \approx 1.67 \text{ \AA}.$$

Видно отличное соответствие между полученными значениями.

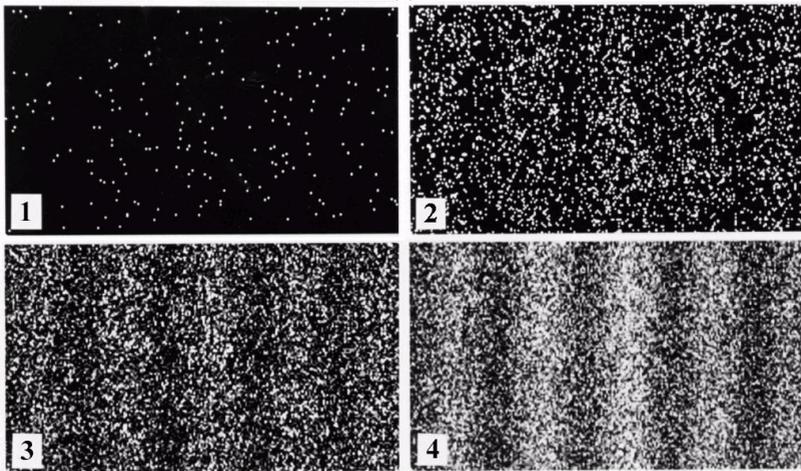
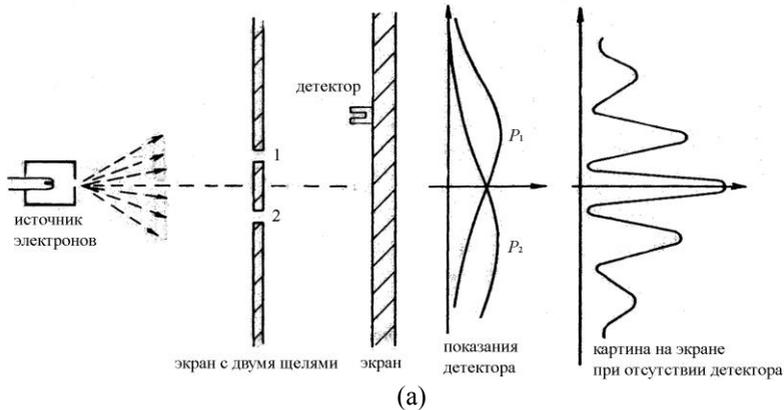
В качестве иллюстрации волновых свойств обсудим рассеяние электронов (протонов, нейтронов) на двух щелях<sup>2</sup>, разнесённых на расстояние порядка длины волны, соответствующей частице при данной скорости (рис. 7). Если электрон ведёт себя как волна, ожидаемый результат – система интерференционных полос. Если же каждый электрон пролетает через конкретную щель, т.е. ведёт себя как частица, должна получиться картина в виде пятен напротив щелей. Интенсивность пучка может быть очень небольшой, так что отдельные электроны рассеиваются независимо. Как следует из опыта Дэвиссона, наблюдаются интерференционные полосы. Значит ли это, что электрон прошёл через оба отверстия и интерферировал сам с собой?

Выход из создавшегося затруднения нашли Нильс Бор и Вернер Гейзенберг. Электрон – неделимая частица, он может пройти только через одну щель. Но с ним связана «волна вероятности», или «волновая функция», которая «доставляет» электрон в ту или иную щель, и при прохождении многих электронов через две щели, они попадают на экран в местах, описываемых интерференционной картиной, связанной с волной вероятности. Такая интерпретация связана с неопределённостью локализации электрона (в данном случае, с невозможностью с определённой предсказать, через какую из щелей проходит электрон). Если же подключить детекторы, стоящие у каждой щели и определяющие, через какую из них прошёл каждый из электронов, то интерференционная картина разрушается и обнаруживаются только два пика интенсивности прямо за щелями. От-

---

<sup>2</sup> Фейнман Р., Лейтон Р., Сэндс М. Фейнмановские лекции по физике. Т. 3. Излучение, волны, кванты. М.: Мир, 1965. 238 с.

сюда вытекает ещё одна неожиданная для классической физики особенность: *результат измерения зависит от того, как это измерение было проведено*. Само по себе выполнение измерений, таким образом, влияет на состояние системы.



(б)  
**Рис. 7. Рассеяние электронов на двух щелях: а) – схема эксперимента; б) – формирование интерференционной картины на экране по мере увеличения числа электронов: 100, 3000, 20000, 70000<sup>3</sup>**

<sup>3</sup> Tonomura A. et al. Demonstration of single-electron buildup of an interference pattern. American Journal of Physics, 1989, V. 57 (2), pp.117–120.

#### 1.4. Волновой пакет, фазовая и групповая скорости

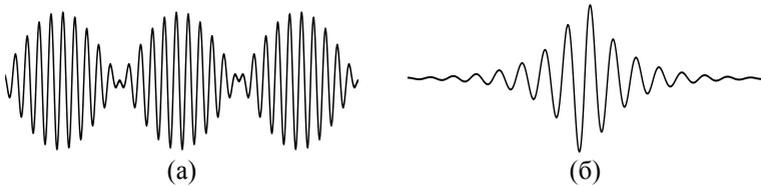
Рассмотрим «плоскую волну» и формально ассоциируем её с частицей с энергией  $E$  и импульсом  $\vec{p}$  с учётом формул (1.11) и (1.12):

$$f(\vec{r}, t) = A \exp(-i(\omega t - \vec{r} \cdot \vec{k})) = A \exp\left(-\frac{i(Et - \vec{r} \cdot \vec{p})}{\hbar}\right). \quad (1.13)$$

Но волна, описывающая частицу, должна быть локализована в пространстве. Рассмотрим сумму монохроматических волн (для простоты возьмём одномерный случай) с  $k_1 \approx k_2$ ,  $\omega_1 \approx \omega_2$ . Тогда:

$$\begin{aligned} f_1 &= a \cos(\omega_1 t - k_1 x), & f_2 &= a \cos(\omega_2 t - k_2 x), \\ f &= f_1 + f_2 = \\ &= 2a \cos\left(\frac{\omega_1 - \omega_2}{2} t - \frac{k_1 - k_2}{2} x\right) \cos\left(\frac{\omega_1 + \omega_2}{2} t - \frac{k_1 + k_2}{2} x\right) = \\ &= 2a \cos\left(\frac{\Delta\omega}{2} t - \frac{\Delta k}{2} x\right) \cos(\omega t - kx). \end{aligned}$$

Частота  $\Delta\omega$  мала по сравнению с  $\omega$ , и поэтому  $f$  содержит высокую и низкую частоты (рис. 8, а). Взяв много гармоник с небольшой дисперсией частот, можно добиться ограниченности волнового пакета (рис. 8, б) и попытаться сопоставить его с частицей.



**Рис. 8. Сложение монохроматических волн различных частот: а) – биения близких частот; б) – одиночный волновой пакет.**

При дисперсии частот можно рассматривать две скорости волны: *групповую* и *фазовую*. Фазовую скорость можно определить из условия равенства фазы колебаний (например, следя за вершинами высокочастотной волны):

$$\omega t - kx = const,$$

откуда

$$v_{\text{фаз}} = \frac{dx}{dt} = \frac{\omega}{k}.$$

Но тогда

$$v_{\text{фаз}} = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{p} = \frac{p}{2m} = \frac{v}{2}.$$

Для определения групповой скорости используется условие

$$\frac{\Delta\omega}{2}t - \frac{\Delta k}{2}x = \text{const},$$

откуда следует

$$v = \frac{dx}{dt} = \frac{\Delta\omega}{\Delta k} \Rightarrow \frac{d\omega}{dk}.$$

Тогда:

$$v_{\text{гр}} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d(\hbar\omega)}{d(\hbar k)} = \frac{dE}{dp} = \frac{d}{dt} \left( \frac{p^2}{2m} \right) = \frac{p}{m} = v.$$

Ясно, что если ассоциировать с частицей волну, то нужно брать групповую скорость в качестве скорости частицы.

Теперь сложим не две волны, а возьмём суперпозицию континуума волн, т.е. «волновой пакет»:

$$\psi(\vec{r}, t) = \int f(\vec{k}) \exp(-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})) d\vec{k}, \quad (1.14)$$

где  $f(\vec{k}) \approx 0$  вне малой окрестности  $k_0$ . Например (в одномерном случае) возьмём гауссову функцию

$$f(k) = \exp\left(-\frac{(k - k_0)^2}{2(\Delta k)^2}\right),$$

локализованную вблизи  $k_0$ . Для простоты положим  $t = 0$ , и заменим  $x \rightarrow x - x_0 = \Delta x$ , тогда

$$\begin{aligned}
\psi(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} f(k - k_0) \exp(i(x - x_0)) dk = \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{(k - k_0)^2}{2(\Delta k)^2} + ik(x - x_0)\right] dk = \\
&= \sqrt{2\pi \cdot \Delta k} \exp\left[ik(x - x_0) - \frac{1}{2}(x - x_0)^2(\Delta k)^2\right].
\end{aligned} \tag{1.15}$$

Ясно, что этот «пакет» (заполненный быстрыми осцилляциями) локализован вблизи  $x_0$  и  $\psi(x) \approx 0$  когда  $(\Delta x)^2 \equiv (x - x_0)^2 \geq \frac{1}{(\Delta k)^2}$ .

Для монохроматической волны  $\Delta k = 0$  и  $\Delta x = \infty$  – волна занимает все пространство. Таким образом, мы обнаружили важную связь между  $\Delta x$  и  $\Delta k$  (следовательно, и между  $\Delta x$  и  $\Delta p$ ) – их произведение не может быть произвольным, что соответствует соотношению неопределённости Гейзенберга:

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar. \tag{1.16}$$

Позже мы придём к этому соотношению, используя более строгие аргументы.

Аналогично, для функции  $\psi(\omega)$ , локализованной около  $\omega_0$ , запишем:

$$\psi(t) = \int_{-\infty}^{\infty} f(\omega - \omega_0) \exp(-i\omega(t - t_0)) d\omega. \tag{1.17}$$

Взяв для  $f(\omega)$  гауссову функцию

$$f(\omega) = \exp\left(-\frac{(\omega - \omega_0)^2}{2(\Delta\omega)^2}\right), \tag{1.18}$$

и проведя выкладки, аналогичные (1.15), получим, что  $\psi(t) \approx 0$ , когда  $\Delta t \cdot \Delta\omega \geq 1$  – хорошо известное из радиотехники соотношение: антенна с хорошей избирательностью не может принять

короткие сигналы. Это соответствует соотношению неопределённости для времени и энергии:

$$\Delta t \cdot \Delta E \geq \hbar. \quad (1.19)$$

Соотношение (1.19) проявляется во многих ситуациях. Например, в *теории Юкавы* ядерные силы описываются обменом  $\pi$ -мезонами между нуклонами (протонами и нейтронами). Энергия спонтанно возникающего мезона с массой  $m$  – порядка  $mc^2$ . Для того, чтобы возникающий при возникновении мезона дисбаланс энергии не вступал в противоречие с сохранением энергии, процесс излучения и поглощения должен произойти за время  $\Delta t \sim \hbar / \Delta E \sim \hbar / mc^2$ . За это время мезон пролетает расстояние  $c\Delta t \sim \hbar / mc$ . Если приравнять это расстояние размеру ядра, взяв для него значение  $r \approx 1.4 \cdot 10^{-13}$  см, то получим  $mc^2 = \hbar c / r \approx 130$  МэВ. Вскоре после предположения Юкавы (1935 г.)  $\pi$ -мезоны с примерно такой предсказанной массой были обнаружены экспериментально.

В заключение отметим, что волновой пакет вследствие дисперсии со временем «расплывается». Оценим это время. Пусть начальный размер пакета  $\Delta x \equiv a_0$ , тогда из соотношения неопределённости  $\Delta p \approx \hbar / \Delta x$  следует  $\Delta v \approx \hbar / m\Delta x$ . Через время  $t$  размер пакета становится равным  $\Delta d = t\Delta v = \hbar t / ma_0$ . Соответственно, время, в течение которого размер пакета удвоится (т.е.  $\Delta d \approx 2a_0$ ):

$$t \approx \frac{ma_0^2}{\hbar}.$$

Для  $m \sim 10^{-24}$  г (протон) и  $a_0 \sim 10^{-13}$  см время ничтожно мало:  $t \sim 10^{-23}$  с. Таким образом, для описания частиц волновые пакеты использовать нельзя. Но их концепция привела нас к соотношению неопределённости, а использование плоской волны позволяет сформулировать уравнение Шрёдингера.

## 2. ВОЛНОВАЯ ФУНКЦИЯ

### 2.1. Уравнение Шрёдингера

Начнём с плоской волны, в выражении для которой учтены квантовые соотношения (1.11) и (1.12):

$$\Psi(\vec{r}, t) = A \exp\left(\frac{-i(Et - \vec{r} \cdot \vec{p})}{\hbar}\right). \quad (2.1)$$

Продифференцируем эту волновую функцию по времени и дважды по координатам:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{iE}{\hbar} A e^{-i(Et - \vec{p} \cdot \vec{r})/\hbar} = -\frac{iE}{\hbar} \Psi.$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \vec{r}} = \frac{i\vec{p}}{\hbar} A e^{-i(Et - \vec{p} \cdot \vec{r})/\hbar} = \frac{i\vec{p}}{\hbar} \Psi,$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial \vec{r}^2} = \left(\frac{i\vec{p}}{\hbar}\right)^2 \Psi.$$

С учётом соотношения  $E = \vec{p}^2 / (2m)$ , мы приходим к соотношению (здесь  $\Delta = \nabla^2$ ):

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi. \quad (2.2)$$

Мы получили уравнение Шрёдингера для свободной частицы – конечно, это не настоящий «вывод» уравнения для частицы, т.к. за основу взята плоская волна, скорее это аргументы при поиске подходящего уравнения.

Формально уравнение (2.2) можно получить, заменяя физические переменные  $E$  и  $\vec{p}$  на операторы:

$$\hat{E} \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad \hat{\vec{p}} \rightarrow -i\hbar \nabla, \quad (2.3)$$

и действуя затем этими операторами, входящими в равенство  $\hat{E} = \hat{\vec{p}}^2 / (2m)$ , на функцию  $\Psi(\vec{r}, t)$ . Формулы (2.3) дают так

называемый *принцип соответствия* между классическими величинами и квантовыми операторами.

Уравнение (2.2) справедливо лишь для волновой функции свободной частицы. Если есть взаимодействие (потенциальная энергия  $U \neq 0$ ), то полная энергия

$$\hat{E} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U.$$

Тогда уравнение Шрёдингера примет вид:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U \right) \Psi. \quad (2.4)$$

Потенциальная энергия обычно не содержит операторов дифференцирования, т.е. является обычной функцией. Поэтому символ оператора («шляпку») у неё опускают.

Если в системе  $n$  частиц, её волновая функция зависит от координат каждой из них:

$$\Psi = \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n, t),$$

и уравнение (2.3) обобщается следующим образом:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n, t)}{\partial t} = \left( -\frac{\hbar^2}{2} \left[ \frac{\Delta_1}{m_1} + \frac{\Delta_2}{m_2} + \dots \right] + U(x_1, x_2, \dots, t) \right) \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n, t). \quad (2.5)$$

Оператор энергии системы  $\hat{E}$ , выраженный через обобщённые координаты и импульсы частиц, является *гамильтонианом* системы:

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{T}(q_i, \hat{p}_i, t) + U(q_i, t),$$

где  $q_i$  – обобщённые координаты,  $\hat{p}_i = -i\hbar(\partial/\partial q_i)$  – обобщённые импульсы,  $i=1, \dots, n$ . Тогда, в общем виде *уравнение Шрёдингера* имеет вид:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(q_i, t)}{\partial t} = \hat{\mathcal{H}} \Psi(q_i, t), \quad (2.6)$$

где  $\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}(q_i, \hat{p}_i, t)$ .

Отметим, что уравнение Шрёдингера является линейным дифференциальным уравнением в частных производных второго порядка по координатам и первого по времени. Первый порядок по времени означает, что нужно лишь одно начальное условие  $\Psi(t_0)$ . Для решения также необходимы краевые условия, которые мы обсудим для конкретных задач. Так как уравнение (2.6) линейное, то выполняется *принцип суперпозиции*: если  $\Psi_1$  и  $\Psi_2$  – решения этого уравнения, то их линейная комбинация  $\lambda_1\Psi_1 + \lambda_2\Psi_2$  тоже является его решением. Физический смысл принципа суперпозиции мы обсудим позже.

Рассмотрим *стационарную задачу*, т.е. случай не зависящей от времени энергии системы. В этом случае волновую функцию можно факторизовать (для простоты у координаты опустим индекс  $i$ ):

$$\Psi(q, t) = \psi(q) e^{-iEt/\hbar}. \quad (2.7)$$

Подставив выражение (2.7) в уравнение (2.6), получим:

$$\hat{\mathcal{H}}\psi(q) = E\psi(q). \quad (2.8)$$

Уравнение (2.8) называется *стационарным* уравнением Шрёдингера, соответственно, уравнение (2.6) называется *нестационарным* уравнением Шрёдингера.

Для одной частицы уравнение (2.8) принимает вид

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(q) \right) \psi(q) = E\psi(q). \quad (2.9)$$

Математически, это *уравнение Гельмгольца*:

$$\Delta\psi(q) + k^2\psi(q) = 0, \quad (2.10)$$

где введено волновое число

$$k = \frac{\sqrt{2m(E-U)}}{\hbar}. \quad (2.11)$$

## 2.2. Вероятностная интерпретация волновой функции

В концепции Нильса Бора волновая функция интерпретируется следующим образом. Величина

$$\rho(\vec{r}, t) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 = \Psi(\vec{r}, t)\Psi^*(\vec{r}, t) \geq 0 \quad (2.12)$$

определяет *плотность вероятности* нахождения частицы в точке  $\vec{r}$  в момент времени  $t$ . При этом полная вероятность найти частицу по всему объёму, доступному системе

$$\int_V |\Psi(\vec{r}, t)|^2 dV = \text{const.} \quad (2.13)$$

В случае одномерного движения вероятность обнаружения частицы на промежутке  $[a, b]$ :

$$\int_a^b |\Psi(x, t)|^2 dx = w(a \leq x \leq b). \quad (2.14)$$

Плотность вероятности  $|\Psi(x, t)|^2$  даёт возможность определения среднего значения любой физической величины  $f(x)$ :

$$\bar{f}(x) \equiv \langle f(x) \rangle = \int_a^b f(x)\rho(x, t) dx = \int_a^b f(x)|\Psi(x, t)|^2 dx. \quad (2.15)$$

Например, для среднего значения координаты,

$$\bar{x} = \int_a^b x\rho(x, t) dx = \int_a^b x|\Psi(x, t)|^2 dx. \quad (2.16)$$

*Пример.* Проиллюстрируем вероятностную интерпретацию в ситуации с волновой функцией стационарного состояния в потенциале (он изображен на рис. 9)

$$\psi(x) = \begin{cases} 2a\sqrt{ax}\exp(-ax), & x > 0, \\ 0, & x < 0. \end{cases} \quad (2.17)$$

Зная волновую функцию, рассчитаем далее:

- положение максимума плотности вероятности – координата точки, в которой наибольший шанс обнаружить частицу;
- среднее значение и дисперсию координаты;
- вероятность найти частицу на интервале от 0 до  $1/a$ ;
- волновую функцию в пространстве импульсов;
- среднее значение и дисперсию импульса.

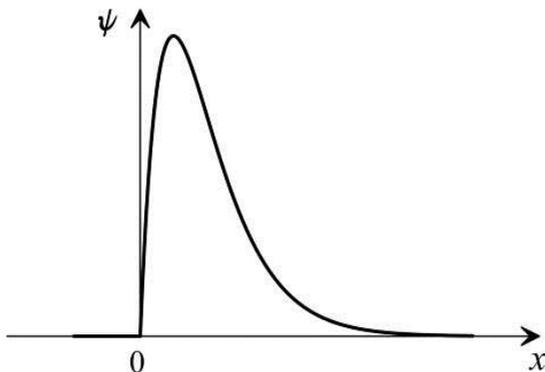
Максимум плотности вероятности  $\rho(x)$  определяется уравнением

$$\frac{d\rho(x)}{dx} = \frac{d|\psi(x)|^2}{dx} = 0. \quad (2.18)$$

Соответственно,

$$\frac{d|\psi(x)|^2}{dx} = \frac{d}{dx}(x^2 \exp(-2ax)) = 2x(1 - ax)\exp(-2ax) = 0,$$

откуда  $x = 1/a$ .



**Рис. 9.** Зависимость волновой функции от координаты для примера (2.17)

Среднее значение и дисперсия координаты определяются с применением формулы (2.15):

$$\bar{x} = \int_0^{\infty} x(4a^3 x^2 \exp(-2ax)) dx = \frac{1}{4a} \int_0^{\infty} y^3 \exp(-y) dy = \frac{3}{2a}, \quad (2.19)$$

$$\overline{x^2} = \int_0^{\infty} x^2 (4a^3 x^2 \exp(-2ax)) dx = \frac{3}{a^2}, \quad (2.20)$$

$$D(x) = \overline{x^2} - \bar{x}^2 = \frac{3}{4a^2}.$$

Вероятность найти частицу в указанном интервале:

$$P = \int_0^{1/a} 4a^3 x^2 \exp(-2ax) dx = \frac{1}{2} \int_0^2 y^2 \exp(-y) dy \approx 0.32.$$

Волновая функция в *импульсном представлении* (в следующем учебном пособии будут приведены более подробные сведения об импульсном представлении) дается Фурье-преобразованием:

$$\begin{aligned} \phi(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_0^{\infty} \exp\left(-\frac{ipx}{\hbar}\right) (2a\sqrt{a}) x \exp(-ax) dx = \\ &= \sqrt{\frac{4a^3}{2\pi\hbar}} \frac{d}{da} \int_0^{\infty} \exp\left(-\frac{ipx}{\hbar} - ax\right) dx = -\sqrt{\frac{4a^3}{2\pi\hbar}} \frac{1}{(a + ip/\hbar)^2}. \end{aligned}$$

Отсюда

$$\bar{p} = \int_{-\infty}^{\infty} p |\phi(p)|^2 dp = \frac{4a^3}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{p}{(a^2 + p^2/\hbar^2)^2} dp = 0. \quad (2.21)$$

Видно, что средний импульс равен нулю, поскольку частица в рассматриваемой задаче находится в *потенциальной яме* и не совершает неограниченного движения (см. далее, п. 4.1).

$$\overline{p^2} = \frac{4a^3}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{p^2}{(a^2 + p^2/\hbar^2)^2} dp = \frac{8a^3}{2\pi\hbar} \int_0^{\infty} \frac{p^2}{(a^2 + p^2/\hbar^2)^2} dp. \quad (2.22)$$

Замена переменных  $p = \hbar a \operatorname{tg} \theta$  в интеграле дает:

$$\overline{p^2} = \frac{4a^2 \hbar^2}{\pi} \int_0^{\pi/2} \sin^2 \theta d\theta = \hbar^2 a^2, \quad (2.23)$$

$$D(p) = \overline{p^2} - \bar{p}^2 = \hbar^2 a^2.$$

Наконец, используя тот факт, что среднеквадратическое отклонение равно квадратному корню из дисперсии величины, можно записать соотношение неопределённости для данной частицы:

$$\Delta x \cdot \Delta p = \frac{\sqrt{3}}{2a} \cdot \hbar a = \frac{\sqrt{3}}{2} \hbar > \hbar.$$

Видно, что соотношение Гейзенберга (1.16) выполняется.

### 2.3. Уравнение непрерывности

Рассмотрим нестационарное уравнение Шрёдингера и запишем его комплексное сопряжение:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} &= \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U \right) \Psi, \\ -i\hbar \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} &= \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U \right) \Psi^*. \end{aligned} \quad (2.24)$$

Умножая первое на  $\Psi^*$ , а второе на  $\Psi$ , и вычитая полученные выражения, приходим к уравнению:

$$\frac{\partial |\Psi|^2}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m} (\Psi^* \Delta \Psi - \Psi \Delta \Psi^*).$$

Введём обозначения

$$\rho = |\Psi|^2, \quad \vec{j} = \frac{i\hbar}{2m} (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi), \quad (2.25)$$

с учётом которых уравнение (2.25) принимает вид:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j} = 0. \quad (2.26)$$

Уравнение (2.26) называется *уравнением непрерывности*. В него входит *плотность вероятности*  $\rho$  и *вектор плотности тока*  $\vec{j}$  вероятности (для краткости, далее – *ток*). Для свобод-

ной частицы, описываемой плоской волной (2.1), ток определяется импульсом частицы:

$$\vec{j} = A^2 \frac{P}{m} \vec{n},$$

где  $\vec{n}$  – единичный вектор в направлении движения. Если положить  $A=1$  (как мы увидим дальше, «правильная» нормировка дает  $A=(2\pi\hbar)^{-1/2}$ , но сейчас это различие не существенно), ток  $\vec{j} = \vec{v}$ , где  $\vec{v}$  - скорость частицы. Для действительной волновой функции ток  $\vec{j} = 0$ . Уравнение непрерывности выражает своего рода закон сохранения – вероятность обнаружить частицу в той или иной точке определяется только плотностью тока. Законы сохранения такого вида хорошо известны в классической физике – механике, электродинамике. С формальной точки зрения, плотность вероятности ведёт себя как классическая величина.

Проинтегрируем уравнение (2.26) по объёму:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \rho dV + \int \operatorname{div} \vec{j} dV = 0.$$

По теореме Гаусса интеграл от дивергенции вектора по объёму преобразуется в поверхностный интеграл  $\oint j_n dS$ , и для большого объёма, когда на границе  $\Psi \rightarrow 0$ , этот интеграл равен нулю. Тогда

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \rho dV = 0,$$

откуда следует сохранение полной вероятности

$$\int |\Psi|^2 dV = \text{const}. \quad (2.27)$$

### 3. ОДНОМЕРНЫЕ ЗАДАЧИ

#### 3.1. Общие свойства одномерного движения

Одномерное стационарное уравнение Шрёдингера  $\hat{H}\psi(x) = E\psi(x)$  для частицы с массой  $m$  и потенциальной энергией  $U(x)$  (для простоты будем говорить «частица в потенциале  $U(x)$ »), имеет вид

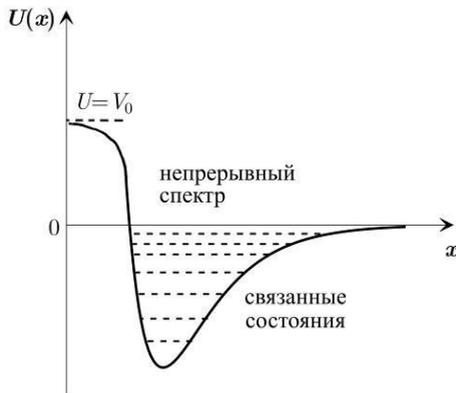
$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) \right) \psi(x) = E\psi(x), \quad (3.1)$$

или, в форме уравнения Гельмгольца:

$$\psi''(x) + k^2\psi(x) = 0, \quad (3.2)$$

где  $k = \sqrt{2m(E-U)}/\hbar$ . В области  $E - U < 0$  удобно заменить  $k \rightarrow i\kappa$ , где  $\kappa = \sqrt{2m|E-U|}/\hbar$  – вещественная величина.

Отметим некоторые важные свойства одномерного движения, которые следуют из общих свойств линейных дифференциальных уравнений второго порядка.



**Рис. 10.** Фinitное и инфинитное движение. Дискретный и непрерывный спектр

Если частица не уходит на бесконечность, такое движение называется *финитным*, а волновые функции – соответствующими *связанным состояниям* (рис. 10). В этом случае спектр энергии и набор соответствующих ему волновых функций дискретен, а волновые функции оказываются вещественными.

Энергетический спектр связанных состояний в одномерном пространстве всегда *невырожденный*. В самом деле, допустим, что существуют две линейно независимых волновых функции  $\psi_1(x)$  и  $\psi_2(x)$ , отвечающие одной и той же энергии  $E$ . Из уравнений Шрёдингера для этих функций

$$\psi_1'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\psi_1 = 0, \quad \psi_2'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\psi_2 = 0,$$

непосредственно следует равенство

$$\frac{\psi_1''}{\psi_1} = \frac{\psi_2''}{\psi_2}.$$

Отсюда

$$\psi_1''\psi_2 - \psi_2''\psi_1 = (\psi_1'\psi_2)' - (\psi_2'\psi_1)' = 0.$$

Интегрируя это соотношение:

$$\psi_1'\psi_2 - \psi_2'\psi_1 = \text{const},$$

и учитывая, что на бесконечности волновая функция (при финитном движении) должна быть равна нулю, получаем, что постоянная интегрирования также равна нулю. Таким образом, приходим к равенству *логарифмических производных*:

$$\frac{\psi_1'}{\psi_1} = \frac{\psi_2'}{\psi_2},$$

откуда непосредственным интегрированием находим:

$$\ln \psi_1 = \ln \psi_2 + \ln C, \quad \psi_1 = C\psi_2.$$

Таким образом, функции  $\psi_1(x)$  и  $\psi_2(x)$  линейно зависимы, что противоречит исходному утверждению.

Итак, спектр энергии связанных состояний в одномерных системах невырожденный. Это утверждение неверно для случая большого числа измерений. Например, при движении частицы в кулоновском потенциале (в атоме) при ненулевом значении орбитального момента, соответствующем орбитальному квантовому числу  $l$ , есть  $(2l + 1)$ -кратное вырождение состояний.

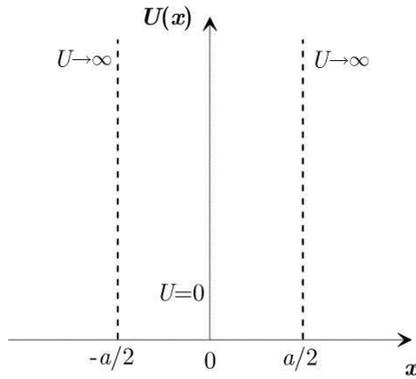
При финитном движении справедлива *осцилляционная теорема*: для дискретных уровней  $n$ -я собственная функция  $\psi_n(x)$  имеет  $(n-1)$  ноль на всём интервале движения (не считая нулей на границах). Соответственно этому, волновая функция *основного состояния*  $\psi_1(x)$  – состояния с наименьшей энергией – не имеет нулей вовсе.

Если движение *инфинитно*, то наоборот, спектр энергии сплошной, а соответствующие состояния называются *несвязанными*. При этом функция  $\psi$  непрерывна всюду. Из уравнения Шрёдингера непосредственно следует, что её производная  $\psi'$ , и, соответственно, логарифмическая производная  $\psi'/\psi$ , также непрерывны, в том числе в точках разрыва потенциала, если потенциальная энергия  $U$  не имеет бесконечных скачков (в таких точках  $\psi'$  имеет разрывы). Энергетический спектр несвязанных состояний частицы, которая может неограниченно двигаться в обе стороны (т.е.  $E > V_0$ , рис. 10), оказывается двукратно вырожденным.

Далее мы рассмотрим несколько стационарных одномерных задач, в которых потенциальная энергия задаётся кусочно-постоянными модельными потенциалами, для которых уравнение Шрёдингера может быть решено аналитически.

### **3.2. Бесконечно глубокая прямоугольная потенциальная яма**

В качестве первого примера рассмотрим частицу в *бесконечно глубокой* одномерной потенциальной яме шириной  $a$  (рис. 11). Такую яму частица покинуть не может, поэтому граничные условия имеют вид  $\psi(x = \pm a/2) = 0$ .



**Рис. 11. Прямоугольная потенциальная яма бесконечной глубины**

В этой задаче энергия не зависит от времени, поэтому рассмотрим стационарное уравнение:

$$\hat{\mathcal{H}}\psi(x) = E\psi(x),$$

или, с учётом

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}, \quad (3.3)$$

$$\psi'' + k^2\psi = 0,$$

где  $k^2 = 2mE / \hbar^2$ . Ясно, что  $k = p / \hbar$  – волновое число. Решение этого уравнения

$$\psi(x) = C_1 e^{ikx} + C_2 e^{-ikx}. \quad (3.4)$$

Из краевых условий следует:

$$\psi(-a/2) = C_1 e^{-ika/2} + C_2 e^{ika/2} = 0,$$

$$\psi(a/2) = C_1 e^{ika/2} + C_2 e^{-ika/2} = 0.$$

Эта система однородных уравнений для  $C_1$  и  $C_2$  имеет нетривиальное решение, только если её определитель равен нулю:

$$\Delta = \begin{vmatrix} e^{-ika/2} & e^{ika/2} \\ e^{ika/2} & e^{-ika/2} \end{vmatrix} = 0. \quad (3.5)$$

Отсюда следует  $e^{-ika} - e^{ika} = 0$ , или  $\sin ka = 0$ , что определяет *дискретный* набор волновых чисел

$$k_n = \frac{\pi n}{a}, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (3.6)$$

и *дискретный спектр* энергии:

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2}. \quad (3.7)$$

При формальном переходе к классической механике ( $\hbar \rightarrow 0$ ) спектр энергии становится непрерывным. Кроме того, разница энергий соседних уровней, равная

$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (n^2 + 2n + 1 - n^2) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (2n + 1), \quad (3.8)$$

стремится к нулю при увеличении ширины ямы – спектр становится сплошным, как и в классическом случае.

Так как определитель (3.5) равен нулю, то, взяв произвольное  $C_1 = C$ , получим

$$C_2 = -Ce^{-ika} = -Ce^{-in\pi} = -C \cos n\pi = -(-1)^n C.$$

Тогда при чётных  $n$

$$\psi_n(x) = C \cos \frac{n\pi x}{a},$$

а при нечётных

$$\psi_n(x) = C \sin \frac{n\pi x}{a}.$$

Определённая чётность следует из чётности потенциальной энергии  $U(x)$ .

Покажем также другой способ решения этой задачи. Для финитного движения при нахождении волновых функций удобно записать решение в действительной форме:

$$\psi(x) = A \sin(kx + \delta). \quad (3.9)$$

Удобно сместить начало координат, так чтобы яма располагалась на интервале  $(0, a)$ , тогда из краевого условия  $\psi(0) = 0$  получаем  $\delta = 0$ . Из условия  $\psi(a) = 0$  получаем, как и выше,  $ka = n\pi$ ,  $n = 0, 1, 2, \dots$  и тот же самый спектр энергии. Волновая функция

$$\psi_n(x) = A \sin \frac{n\pi x}{a} \quad (3.10)$$

обращается в ноль  $n - 1$  раз (имеет  $n - 1$  узел) на интервале  $(0, a)$ . Тривиальное решение  $\psi_0(x) = 0$  с энергией  $E = 0$  не имеет физического смысла, так как частица с нулевым импульсом не может быть локализована в яме в силу соотношения неопределённости. Также отметим, что ток  $\bar{j} = 0$ , что отвечает финитности движения.

На интервале  $(0, a)$  волновые функции *ортогональны*. Их можно нормировать на единицу:

$$\int_{-a}^a \psi_n^* \psi_m dx = \delta_{nm}. \quad (3.11)$$

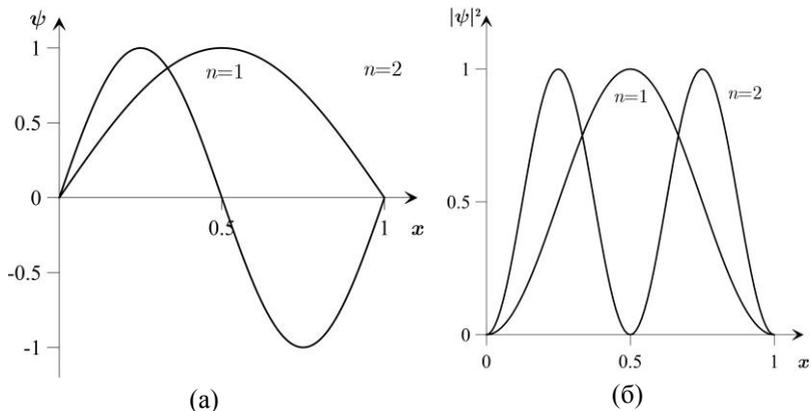
С помощью этой нормировки можно определить значение амплитуды волновой функции:

$$A = \sqrt{2/a}.$$

Полученные волновые функции и соответствующие им плотности вероятностей представлены на рис. 12. Видно, что в состоянии с  $n = 1$  большинство измерений (наблюдений) найдут частицу вблизи центра ямы, при  $n = 2$  таких наиболее вероятных локализаций две, и т.д.

Нестационарные волновые функции  $n$ -го состояния имеют следующий вид:

$$\Psi_n(x, t) = \psi_n(x) e^{-iE_n t / \hbar}. \quad (3.12)$$



**Рис. 12.** Частица в бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме: а) – нормированные волновые функции; б) – нормированная плотность вероятности. Зависимости представлены для двух первых уровней энергии.

Система функций  $\psi_n(x)$  (3.10) – полная на интервале  $(0, a)$ , и их линейная суперпозиция  $\sum a_n \psi_n(x)$  также является решением исходного стационарного уравнения Шрёдингера. Смысл коэффициентов  $a_n$  состоит в следующем: если система находится в состоянии с некоторой волновой функцией  $\psi(x)$ , её можно разложить в ряд по системе функций  $\psi_n(x)$ , тогда квадраты модулей коэффициентов разложения,  $|a_n|^2$  определяют вероятность системе находиться в состоянии  $n$ . Полная вероятность частице быть хоть на одном из уровней равна единице, что приводит к соотношению:

$$\sum |a_n|^2 = 1. \quad (3.13)$$

В случае вещественных функций  $\psi_n(x)$  коэффициенты  $a_n$  также вещественны, и знак модуля можно опустить. Если функции  $\psi_n(x)$  ортогональны и нормированы на единицу, как в соотношении (3.11), коэффициенты  $a_n$  определяются равенством

$$a_n = \int \psi_n(x) \psi(x) dx. \quad (3.14)$$

Теперь можно рассмотреть задачу о частице в трёхмерной прямоугольной потенциальной яме («потенциальном ящике»)

размерами  $2a \times 2b \times 2c$ . Начало координат удобно поместить в геометрический центр ямы. Задав зависимость потенциала по отдельности от каждой из координат в виде

$$U(x) = \begin{cases} 0, & -a \leq x \leq a, \\ U_0, & |x| > a, \end{cases}$$

$$U(y) = \begin{cases} 0, & -b \leq y \leq b, \\ U_0, & |y| > b, \end{cases}$$

$$U(z) = \begin{cases} 0, & -c \leq z \leq c, \\ U_0, & |z| > c, \end{cases}$$

можно представить трёхмерный потенциал как сумму этих трёх функций одной переменной:

$$U(x, y, z) = U(x) + U(y) + U(z). \quad (3.15)$$

Уравнение Шрёдингера (2.9) принимает вид

$$\Delta \psi(x, y, z) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(x, y, z)) \psi(x, y, z) = 0. \quad (3.16)$$

Поскольку полный потенциал (3.15) является суперпозицией независимых одномерных потенциалов, решение уравнения может быть факторизовано:

$$\psi(x, y, z) = \psi_1(x) \psi_2(y) \psi_3(z), \quad (3.17)$$

а полная энергия частицы  $E$  представляется как

$$E = E_1 + E_2 + E_3.$$

Подстановка (3.17) в уравнение (3.16) даёт три уравнения:

$$\psi_2(y) \psi_3(z) \left( \frac{d^2 \psi_1(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(x)) \psi_1(x) \right) = 0, \quad (3.18)$$

и т.д., что эквивалентно трём независимым одномерным уравнениям. Используя решение, полученное выше, для  $U_0 \rightarrow \infty$  получаем

$$E_{1,2,3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2} n_{1,2,3}^2,$$

где  $n_1, n_2, n_3$  – целые числа. Полная энергия определяется этими тремя квантовыми числами:

$$E_{n_1 n_2 n_3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m} \left( \frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} + \frac{n_3^2}{c^2} \right). \quad (3.19)$$

Волновые функции  $\psi_{n_1}$  равны

$$\psi_{n_1}(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{a}} \cos \frac{\pi n_1 x}{2a}, & n_1 = 1, 3, 5 \dots \\ \frac{1}{\sqrt{a}} \sin \frac{\pi n_1 x}{2a}, & n_1 = 2, 4 \dots \end{cases}$$

Такой же вид имеют  $\psi_{n_2}(y)$  и  $\psi_{n_3}(z)$ .

В многомерной задаче может возникнуть *вырождение* энергетических уровней. Если размеры потенциальной ямы в каждом из направлений различны ( $a \neq b \neq c$ ), то каждое значение  $E_{n_1 n_2 n_3}$  соответствует только одной волновой функции, и вырождение отсутствует, поскольку потенциальная яма несимметрична. Если хотя бы два из размеров ямы равны между собой, то может быть несколько различных комбинаций квантовых чисел  $n_1, n_2, n_3$ , при которых реализуется одна и та же энергия. Если  $a = b = c$ , то полная энергия частицы

$$E_{n_1 n_2 n_3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2). \quad (3.20)$$

Например, четыре различные волновые функции с наборами квантовых чисел  $n_1 = 5, n_2 = n_3 = 1, n_1 = n_3 = 1, n_2 = 5$  и  $n_1 = n_2 = 1, n_3 = 5, n_1 = n_2 = n_3 = 3$  соответствуют одному и тому же значению

$$\text{энергии } E = \frac{27\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}.$$

### 3.3. Прямоугольная потенциальная яма конечной глубины

Рассмотрим частицу с энергией  $E$  в потенциальной яме глубиной  $U_0$  (рис. 13), т.е.  $E < U_0$ . В данном случае волновая функция за пределами ямы уже не будет тождественно равна нулю, волновое уравнение описывает возможность проникновения волны вне области ямы. Поэтому уравнение Шрёдингера следует рассматривать в трёх областях – внутри и вне потенциальной ямы.

Соответствующие уравнения для волновых функций и их решения при  $E < U_0$  имеют вид:

$$\begin{aligned} \psi_I'' - \kappa^2 \psi_I &= 0, & \psi_I &= Ae^{\kappa x}, \\ \psi_{II}'' + k^2 \psi_{II} &= 0, & \psi_{II} &= C \sin(kx + \delta), \\ \psi_{III}'' - \kappa^2 \psi_{III} &= 0, & \psi_{III} &= Be^{-\kappa x}, \end{aligned} \quad (3.21)$$

$$\kappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E), \quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E.$$

В решениях  $\psi_I$  и  $\psi_{III}$  отброшены члены, содержащие  $e^{-\kappa x}$  и  $e^{\kappa x}$  соответственно, т.к. они неограниченно растут при  $x \rightarrow \pm\infty$ , что физически бессмысленно.

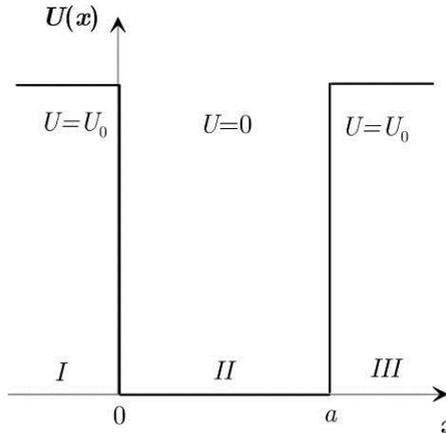


Рис. 13. Прямоугольная потенциальная яма конечной глубины

На границах областей волновые функции и их первые производные должны быть непрерывными. Удобно (но не обязательно) комбинировать граничные условия как равенство *логарифмических производных*:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\psi'_I}{\psi_I}\right)_{x=0} &= \left(\frac{\psi'_{II}}{\psi_{II}}\right)_{x=0}, \\ \left(\frac{\psi'_{II}}{\psi_{II}}\right)_{x=a} &= \left(\frac{\psi'_{III}}{\psi_{III}}\right)_{x=a}, \end{aligned} \quad (3.22)$$

что приводит к равенствам

$$k \operatorname{ctg} \delta = \kappa, \quad k \operatorname{ctg}(ka + \delta) = -\kappa.$$

Отсюда получим:

$$\sin \delta = \frac{k\hbar}{\sqrt{2mU_0}}, \quad \sin(ka + \delta) = -\frac{k\hbar}{\sqrt{2mU_0}}.$$

Разрешая эти соотношения относительно сдвига фазы  $\delta$ , получим трансцендентное уравнение для волнового числа  $k$ , и, следовательно, энергии частицы  $E$ :

$$ka = \pi n - 2 \arcsin \frac{k\hbar}{\sqrt{2mU_0}}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (3.23)$$

где значение аргумента арксинуса лежит в интервале  $[0, \pi/2]$ . Значения  $k_n$ , удовлетворяющие этому уравнению, отвечают точкам пересечения прямой линии  $ka$  и монотонно убывающей правой части (3.23). Собственные значения энергии связаны с волновыми числами соотношением

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2ma^2}. \quad (3.24)$$

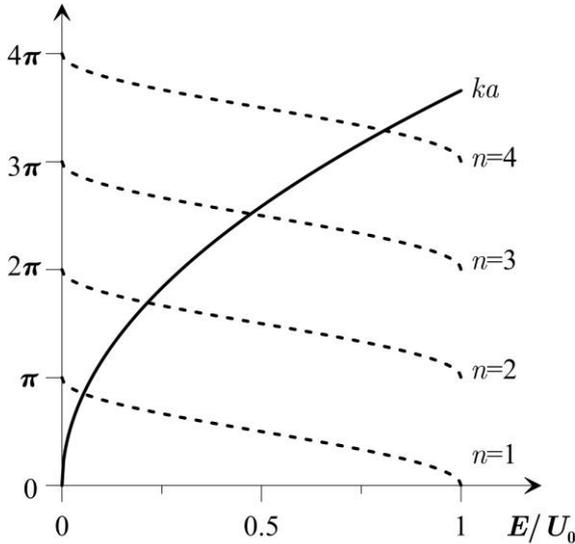
Для очень глубокой ямы  $U_0 \rightarrow \infty$ , и значение  $\arcsin$  стремится к нулю, что даёт полученный выше результат (3.6), (3.7).

Потенциальная яма конечной глубины характеризуется также *энергией связи*. Она равна энергии, которую необходимо

передать частице для освобождения из ямы и перехода к инфинитному движению. В рассматриваемой задаче

$$\varepsilon_n = U_0 - E_n.$$

В качестве конкретного примера найдём уровни энергии электрона ( $m = 9.1 \cdot 10^{-28}$  г) в потенциальной яме глубиной  $U_0 = 5$  эВ и шириной  $a = 10$  Å. Графическое решение уравнения (3.23) для этих параметров представлено на рис. 14. В такой яме существует четыре энергетических уровня – при  $n > 4$  пересечения кривых левой и правой частей равенства (3.23) уже нет т.к. значения  $\arcsin$  не превышают  $\pi / 2$ . Численное решение уравнения (3.23) даёт значения  $E = 0.27, 1.07, 2.37, 4.04$  эВ.



**Рис. 14.** Пример графического решения уравнения (3.23). Сплошная линия – левая часть, пунктир – правые части для разных значений  $n$

Таким образом, видно, что при конечной глубине потенциальной ямы реализуется конечное число возможных энергетических состояний частицы. Можно убедиться, что число состояний существенно возрастает, а сами уровни, соответственно, сближаются, по мере роста массы частицы или ширины по-

тенциальной ямы. Напротив, в яме достаточно малой глубины и ширины существует только один энергетический уровень, близкий к нулю.

В качестве другого примера рассмотрим ядерные силы и оценим глубину ямы с помощью соотношения неопределённости. Ядерные силы имеют радиус действия порядка одного *ферми*,  $r \approx 10^{-13}$  см. Тогда импульс спонтанно рождённой частицы можно оценить как  $p \sim \hbar / r$ , а соответствующую кинетическая энергию как  $E = p^2 / 2M$ , где  $M$  – масса нуклона, примерно 1 ГэВ. Это даёт  $E \approx 3 \cdot 10^{-5}$  эрг  $\approx 19$  МэВ. Таким образом, глубина потенциальной ямы для атомного ядра должна превышать это значение, чтобы ядро оставалось стабильным ( $U_0 > 19$  МэВ). Более точное описание ядерных сил на примере сферически симметричной прямоугольной потенциальной ямы рассмотрено в п. 6.2.

### 3.4. Рассеяние на барьере

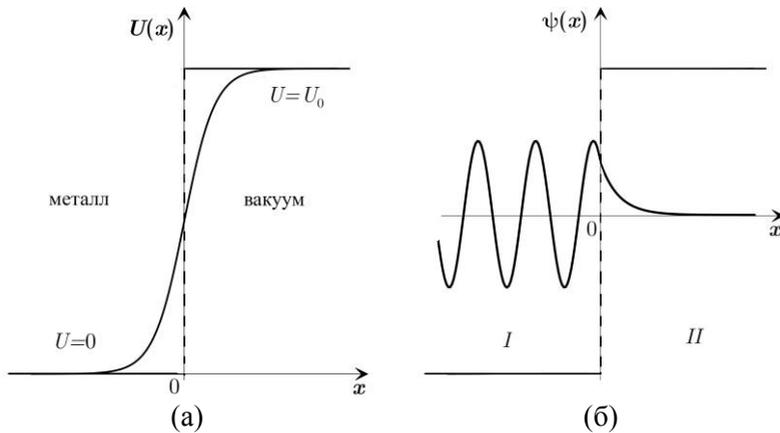
В предыдущих задачах рассматривалось финитное движение и реализовывался дискретный спектр энергии и дискретный набор волновых функций. Простейшим примером задачи с инфинитным движением служит налетание частицы на потенциальный барьер бесконечной ширины (рис. 15, а). В частности, в рассматриваемой постановке может быть рассмотрено приближение электрона проводимости к границе металла изнутри. Высота барьера в этом случае имеет смысл работы выхода электрона.

В классической механике, как известно, частица с кинетической энергией, меньшей высоты барьера при налетании на него отражается обратно, а при большей энергии – свободно проходит через границу. В квантовой (волновой) механике для барьера конечной ширины существует ненулевая вероятность прохождения частицы через него, даже если  $E < U_0$ , и наоборот – отразиться от него при  $E > U_0$ .

Простейшее аналитическое описание явления может быть получено с использованием кусочно-постоянной аппроксимации потенциальной энергии в форме прямоугольной ступеньки высотой  $U_0$  (рис. 15, а).

Рассмотрим движение частиц слева направо с энергией, меньшей высоты барьера ( $E < U_0$ ). Движение в зоне II в этом случае будет финитным, и для определения вида волновой функции удобнее всего взять решение уравнения Шрёдингера в действительной форме:

$$\begin{aligned} \psi_I(x) &= A \sin(kx + \delta), & k^2 &= \frac{2m}{\hbar^2} E, \\ \psi_{II}(x) &= B e^{-\kappa x}, & \kappa^2 &= \frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E). \end{aligned} \quad (3.25)$$



**Рис. 15. Рассеяние на бесконечном барьере: а) потенциал на границе металла и вакуума и его кусочно-линейная аппроксимация; б) волновая функция электрона**

Условия непрерывности на границе областей определяют параметр  $\delta$  и соотношение между  $A$  и  $B$ :

$$\begin{aligned} \psi_I(0) &= \psi_{II}(0): & A \sin \delta &= B, \\ \psi'_I(0) &= \psi'_{II}(0): & A k \cos \delta &= -\kappa B, \end{aligned} \quad (3.26)$$

$$\operatorname{tg} \delta = -\frac{k}{\kappa}, \quad \frac{B}{A} = \frac{k}{\sqrt{k^2 + \kappa^2}}.$$

Амплитуда падающей волны  $A$  при этом остаётся неопределённой, но она может быть принята за единицу, поскольку связана с интенсивностью падающего пучка частиц. Остальные величины

будут рассматриваться относительно неё. Качественный вид волновой функции представлен на рис. 15, б.

Теперь рассмотрим случай при энергии частицы  $E > U_0$ . В этом случае удобно представить решение в комплексном виде:

$$\begin{aligned}\psi_I(x) &= Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \\ \psi_{II}(x) &= Ce^{ikx} + De^{-ikx}.\end{aligned}\tag{3.27}$$

Теперь  $\kappa^2 = 2m(E - U_0) / \hbar^2$ . Первое слагаемое такой волновой функции описывает движение частицы вправо (падающая волна), а второе – влево (отражённая волна), поскольку ток  $\vec{j} \sim \vec{v}$ . При этом следует положить  $D = 0$ , поскольку в этой задаче нет движения частиц к барьеру с правой стороны.

При финитном движении решение стационарного уравнения Шрёдингера всегда может быть выбрано действительным, в форме (3.26), и поэтому ток всегда оказывается равен нулю. В случае инфинитного движения решения (3.27) обязательно являются комплексными, и токи не равны нулю. Определим коэффициент отражения  $R$  и коэффициент прохождения  $T$  через барьер следующим образом:

$$R = \frac{|\vec{j}_{\text{отр}}|}{|\vec{j}_{\text{над}}|}, \quad T = \frac{|\vec{j}_{\text{прош}}|}{|\vec{j}_{\text{над}}|}.\tag{3.28}$$

Они связаны соотношением  $R + T = 1$ .

Подстановка соответствующих частей волновых функций (3.27) в формулу для тока (2.25) позволяет выразить коэффициенты  $R$  и  $T$  через отношения амплитуд волн. Для падающей волны:

$$\begin{aligned}\psi_{\text{над}} &= Ae^{ikx}, \\ \vec{j}_{\text{над}} &= \frac{i\hbar}{2m} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi) = \frac{i\hbar}{2m} A^2 (-2ik) \vec{n} = \frac{\hbar k}{2m} A^2 \vec{n},\end{aligned}\tag{3.29}$$

где  $\vec{n}$  – единичный вектор вдоль направления движения частицы. Для отражённой и прошедшей волн, аналогично:

$$\vec{j}_{\text{отр}} = \frac{\hbar k}{2m} B^2 \vec{n}, \quad \vec{j}_{\text{прош}} = \frac{\hbar \kappa}{2m} C^2 \vec{n}. \quad (3.30)$$

Соответственно,

$$R = \frac{B^2}{A^2}, \quad T = \frac{\kappa}{k} \frac{C^2}{A^2}. \quad (3.31)$$

Коэффициент  $A$  по-прежнему остаётся неопределённым, однако выражения (3.31) дают  $R$  и  $T$  в относительных единицах интенсивности падающей волны.

Коэффициенты  $B/A$  и  $C/A$  находятся сшивкой волновых функций и их производных в точке  $x = 0$ :

$$\begin{aligned} A + B &= C, \\ ik(A - B) &= i\kappa C. \end{aligned} \quad (3.32)$$

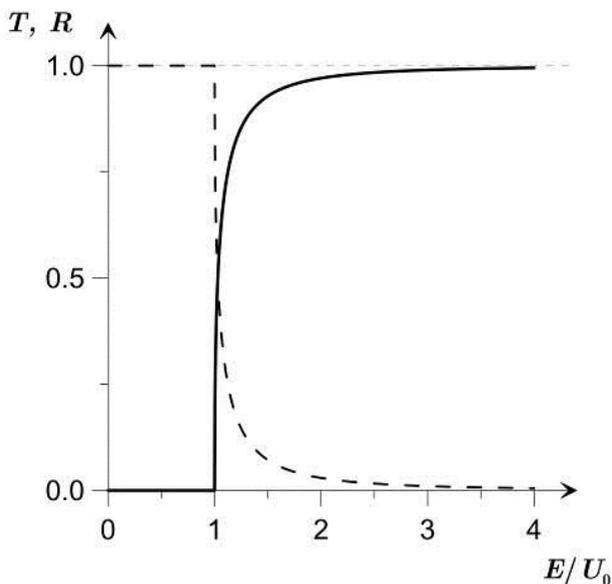
Решение этой системы даёт:

$$\frac{B}{A} = \frac{k - \kappa}{k + \kappa}, \quad \frac{C}{A} = \frac{2k}{k + \kappa}. \quad (3.33)$$

Ясно, что при  $E < U_0$  в рассматриваемой задаче о падении частицы на потенциальную ступеньку  $R = 1$  и  $T = 0$ , поскольку волновая функция в зоне II вещественна, и соответствующий ей ток равен нулю. При  $E > U_0$  коэффициенты  $R$  и  $T$  зависят от энергии:

$$R = \left( \frac{k - \kappa}{k + \kappa} \right)^2, \quad T = \frac{4k\kappa}{(k + \kappa)^2}. \quad (3.34)$$

Умножив  $R$  и  $T$  на число частиц, подходящих к барьеру, получим число отражённых и прошедших частиц. На рис. 16 приведён пример зависимости  $R$  и  $T$  от энергии электрона для ступеньки высотой 15 эВ.



**Рис. 16.** Коэффициент прохождения (сплошная линия) и отражения (штриховая линия) частицы через потенциальную ступеньку

Более точный расчёт применительно к физической задаче выхода электронов из металла требует корректировки выражения для потенциала (см. рис. 15, а). В частности, аналитическое решение уравнения Шрёдингера возможно для потенциальной энергии вида:

$$U(x) = -\frac{U_0}{1 + \exp(x/a)}. \quad (3.35)$$

Заменой переменных уравнение с таким потенциалом может быть сведено к форме, допускающей решение в терминах гипергеометрических функций, подробно исследуемых в соответствующих разделах математической физики.

### 3.5. Туннельный эффект. Эффект Рамзауэра

Перейдём к случаю, когда частица налетает на потенциальный барьер конечной ширины. Чтобы получить аналитиче-

ское решение, рассмотрим прямоугольный барьер высотой  $U_0 = \text{const}$  (рис. 17). Энергия частицы может быть как ниже, так и выше этого значения. Рассмотрим первый случай,  $E < U_0$ .

Как и ранее, запишем для различных областей стационарное уравнение Шрёдингера и его решение:

$$\begin{aligned} \psi_I'' + k^2 \psi_I &= 0, & \psi_I &= e^{ikx} + Ae^{-ikx}, \\ \psi_{II}'' - \kappa^2 \psi_{II} &= 0, & \psi_{II} &= Be^{\kappa x} + Ce^{-\kappa x}, \\ \psi_{III}'' + k^2 \psi_{III} &= 0, & \psi_{III} &= De^{ikx}, \\ k^2 &= \frac{2m}{\hbar^2} E, & \kappa^2 &= \frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E). \end{aligned} \quad (3.36)$$

В  $\psi_{III}$  отброшено нефизическое решение  $e^{-ikx}$ , отвечающее частице, движущейся справа. Амплитуда падающей слева волны  $e^{ikx}$ , сразу принята равной единице, и все остальные амплитуды, таким образом, нормированы на падающую волну.

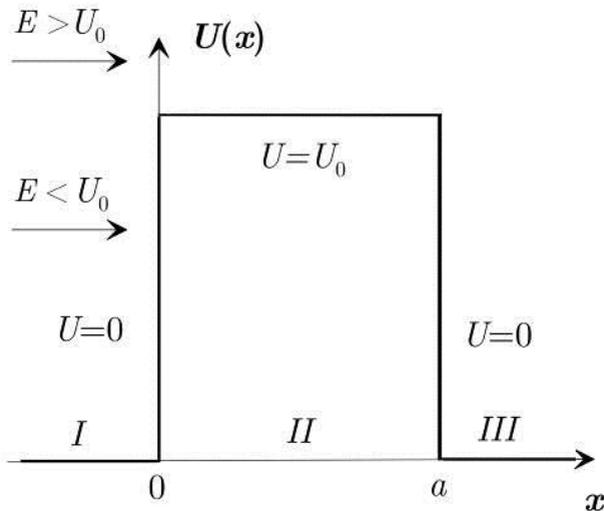


Рис. 17. Прямоугольный потенциальный барьер

Коэффициенты в решениях определяются из граничных условий, задающих непрерывность функций  $\psi$  и  $\psi'$  (поскольку скачок потенциальной энергии  $U$  конечен):

$$\begin{aligned}
 (\psi_I)_{x=0} &= (\psi_{II})_{x=0} : 1 + A = B + C, \\
 (\psi'_I)_{x=0} &= (\psi'_{II})_{x=0} : ik(1 - A) = \kappa(B - C), \\
 (\psi_{II})_{x=a} &= (\psi_{III})_{x=a} : Be^{\kappa a} + Ce^{-\kappa a} = De^{ika}, \\
 (\psi'_{II})_{x=a} &= (\psi'_{III})_{x=a} : \kappa(Be^{\kappa a} - Ce^{-\kappa a}) = ikDe^{ika}.
 \end{aligned} \tag{3.37}$$

Получившиеся линейные уравнения удобно записать в матричной форме:

$$\begin{pmatrix} -1 & 1 & 1 & 0 \\ ik & \kappa & -\kappa & 0 \\ 0 & -e^{\kappa a} & -e^{-\kappa a} & e^{ika} \\ 0 & -\kappa e^{\kappa a} & \kappa e^{-\kappa a} & ike^{ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \\ C \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ ik \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{3.38}$$

Ясно, что падающая слева волна задаётся функцией  $\psi_{пад} = e^{ikx}$ , отражённая волна  $-\psi_{отр} = Ae^{-ikx}$ , а прошедшая через барьер  $-\psi_{прош} = De^{ikx}$ . Понятно, что требуется найти лишь два коэффициента,  $A$  и  $D$ .

Вычисляя главный определитель системы (3.38), найдём

$$\Delta = (\kappa + ik)^2 e^{(-\kappa + ik)a} + (k + i\kappa)^2 e^{(\kappa + ik)a}.$$

Определители, соответствующие коэффициентам  $A$  и  $D$ , следующие:

$$\begin{aligned}
 \Delta_A &= (\kappa^2 + k^2)(e^{(\kappa + ik)a} - e^{(-\kappa + ik)a}), \\
 \Delta_D &= 4i\kappa k.
 \end{aligned}$$

Отсюда получаются выражения для коэффициентов:

$$A = \frac{(\kappa^2 + k^2)(e^{(\kappa+ik)a} - e^{(-\kappa+ik)a})}{(\kappa + ik)^2 e^{(-\kappa+ik)a} + (k + i\kappa)^2 e^{(\kappa+ik)a}}, \quad (3.39)$$

$$D = \frac{4i\kappa k}{(\kappa + ik)^2 e^{(-\kappa+ik)a} + (k + i\kappa)^2 e^{(\kappa+ik)a}}.$$

Вычисление токов (2.25) позволяет определить коэффициент отражения и прохождения частицы через барьер:

$$\vec{j}_{\text{над}} = \frac{\hbar k}{m} \vec{n}, \quad \vec{j}_{\text{отр}} = -\frac{\hbar k}{m} |A|^2 \vec{n}, \quad \vec{j}_{\text{проу}} = \frac{\hbar k}{m} |D|^2 \vec{n}, \quad (3.40)$$

где  $\vec{n}$  – единичный вектор вдоль направления распространения волны. Коэффициенты отражения и прохождения равны:

$$R = |A|^2 = \frac{(\kappa^2 + k^2)^2 (e^{2\kappa a} - 1)^2}{(\kappa^4 + k^4)(e^{2\kappa a} - 1)^2 + 2\kappa^2 k^2 ((e^{\kappa a} + 1)^2 + (e^{\kappa a} - 1)^2)}, \quad (3.41)$$

$$T = |D|^2 = \frac{16\kappa^2 k^2 e^{2\kappa a}}{(\kappa^4 + k^4)(e^{2\kappa a} - 1)^2 + 2\kappa^2 k^2 ((e^{\kappa a} + 1)^2 + (e^{\kappa a} - 1)^2)}.$$

Преобразуя экспоненты и подставляя в полученные формулы выражения для  $k$  и  $\kappa$ , получим (для  $E < U_0$ ):

$$T = \frac{4E(U_0 - E)}{4E(U_0 - E) + U_0^2 \text{sh}^2 \kappa a}, \quad (3.42)$$

$$R = \frac{U_0^2 \text{sh}^2 \kappa a}{4E(U_0 - E) + U_0^2 \text{sh}^2 \kappa a}.$$

В классическом пределе  $\hbar \rightarrow 0$ , коэффициент  $T \rightarrow 0$ . При  $E \ll U_0$ ,  $\kappa a \gg 1$ ,  $\text{sh} \kappa a \approx e^{\kappa a} / 2$ , и  $T$  можно преобразовать к виду

$$T \approx \frac{16E(U_0 - E)}{U_0^2} e^{-2\kappa a}. \quad (3.43)$$

Значение  $T$  сильно уменьшается по мере роста массы частицы, в частности, для протона ( $m_p \approx 1840 m_e$ ) коэффициент прохождения в  $\exp(\sqrt{1840}) \sim 10^{18}$  раз меньше, чем для электрона.

Для случая, когда энергия частицы больше высоты барьера,  $E > U_0$ , выражения для  $R$  и  $T$  могут быть получены из (3.42) заменой  $ka \rightarrow ika$ . С учётом тождества  $\operatorname{sh} ix = i \sin x$ , получаем для  $E > U_0$ :

$$R = \frac{U_0^2 \sin^2 ka}{4E(E - U_0) + U_0^2 \sin^2 ka},$$

$$T = \frac{4E(E - U_0)}{4E(E - U_0) + U_0^2 \sin^2 ka}.$$
(3.44)

В обоих случаях  $\lim_{E \rightarrow U_0} T = 1$ . Описанное решение задачи было впервые получено Дэвидом Бомом.

Важной особенностью квантово-механической задачи является ненулевое значение коэффициента прохождения для частицы, энергия которой ниже высоты барьера – *туннельный эффект*. За барьером частица имеет ту же энергию, что и перед ним.

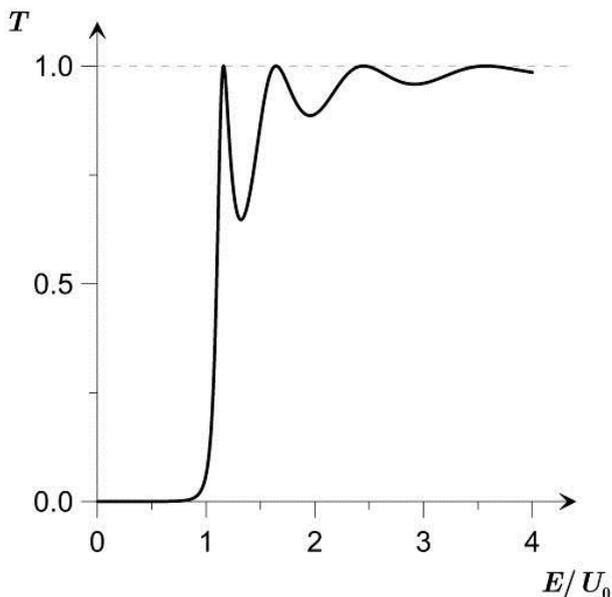
Из формул (3.44) видно, что коэффициент прохождения равен единице при значениях энергии

$$E = U_0 + \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\pi n}{a} \right)^2, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$
(3.45)

При таких значениях энергии импульс частицы  $p = 2mE^{1/2} = n\pi\hbar/a$ , т.е.  $k = p/\hbar = n\pi/a$ , или  $\lambda = 2a/n$ . Таким образом, когда на ширине барьера укладывается целое число полуволен де Бройля, т.е.  $a = n\lambda/2$ , частица свободно проходит через барьер. На рис. 18 в качестве примера приведена зависимость от энергии коэффициента прохождения электрона через прямоугольный барьер высотой  $U_0 = 15$  эВ и шириной  $a = 4$  Å.

Отмеченное явление даёт объяснение известному в атомной физике *эффекту Рамзауэра*, открытому в 1921 г. Карл Рамзауэр изучал рассеяние медленных электронов с энергией порядка единиц эВ в разреженных инертных газах (давление около 0.01 мм рт.ст.). Классическая теория предсказывает, что рассеяние электронов в таких газах должно монотонно ослабевать с

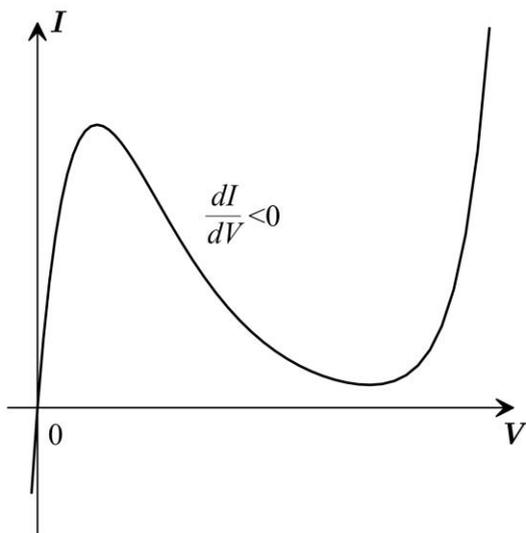
уменьшением их энергии. Однако было обнаружено, что при некоторых значениях энергии (например, для криптона – около 1 эВ) электроны проходят через вещество практически беспрепятственно, не рассеиваясь.



**Рис. 18.** Зависимость коэффициента прохождения через барьер от энергии частицы

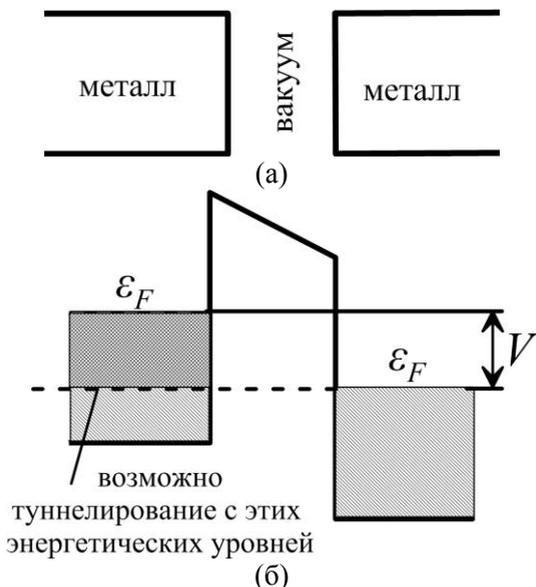
Туннельный эффект нашёл ряд важных приложений. В частности, он определяет особенности транспорта носителей заряда в некоторых типах полупроводниковых приборов. В туннельном диоде электроны преодолевают потенциальный барьер на *p-n*-переходе, существование которого обеспечивается высокой концентрацией внедрённых примесей по сравнению с обычными диодами. Это проявляется в возникновении на вольтамперной характеристике участка с отрицательным наклоном (рис. 19), что соответствует возникновению отрицательного дифференциального электрического сопротивления. Туннельные диоды широко используются для создания усилителей, генераторов и переключателей, работающих в области сверхвысо-

ких частот – до 100 ГГц и выше. Приборы с обычным *p-n*-переходом на таких частотах оказываются непригодны.



**Рис. 19.** Типичная вольт-амперная характеристика туннельного диода. Отмечен участок с отрицательным дифференциальным сопротивлением

Туннельный эффект обуславливает возможность протекания тока при сближении электродов, разделённых тонким слоем диэлектрика – например, механическом контакте проводников, покрытых непроводящей оксидной плёнкой. На рис. 20 показаны две ситуации – когда потенциал пластин одинаков и когда к ним приложено некоторое напряжение. В первом случае энергии электронов в обоих электродах одинаковы, и туннелирования не происходит – энергетические уровни в металле по обе стороны от вакуумного промежутка заполнены одинаково. Во втором случае энергия частиц в одном из электродов оказывается ниже, и становится возможным прохождение частиц через потенциальный барьер.



**Рис. 20.** Два металлических электрода, разделённых вакуумным промежутком: а) – геометрия системы; б) – потенциал под действием приложенного к электродам напряжения  $V$ .  $\varepsilon_F$  – энергия Ферми, максимальная энергия свободных электронов в металле при низких температурах

Другим проявлением туннелирования носителей заряда является *эффект Джозефсона* – протекание тока через тонкую диэлектрическую плёнку между сверхпроводящими контактами. Такой контакт обладает двумя основными особенностями: через него может течь постоянный ток даже при отсутствии приложенного напряжения, а под действием постоянного напряжения через контакт начнёт протекать дополнительный переменный ток. Оба этих явления связаны с квантовомеханической природой явления сверхпроводимости и свойствами носителей заряда в сверхпроводниках – спаренных электронов, т.н. куперовских пар.

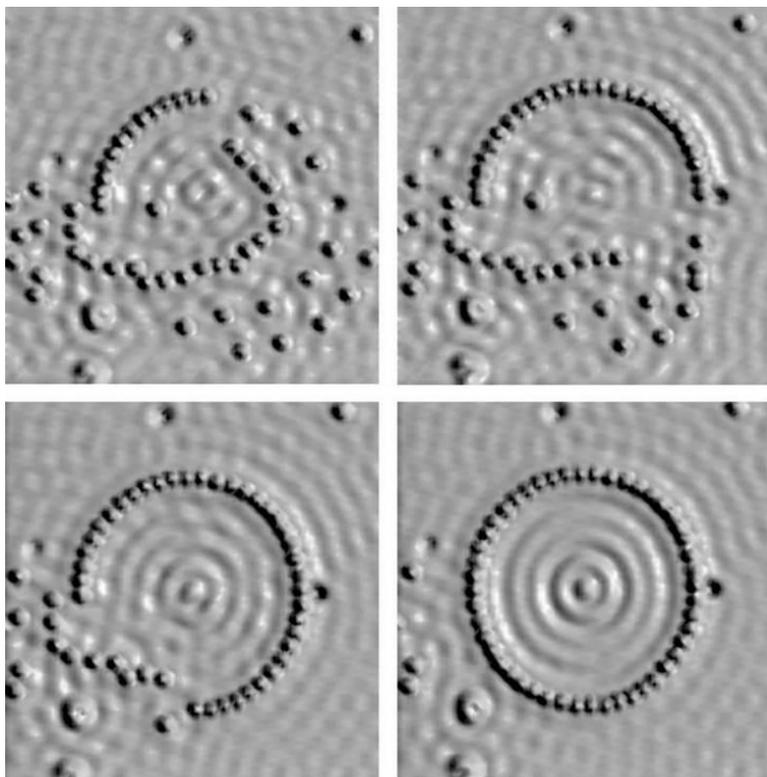
Применяя формулу (3.43), можно получить оценку для коэффициента прохождения:

$$T \sim \exp\left(-\frac{2\sqrt{2m|E|}}{\hbar}a\right). \quad (3.46)$$

Здесь  $a$  – расстояние между электродами. Видно, что коэффициент прохождения и связанный с ним *туннельный ток* сильно зависит от расстояния между электродами. Типичные расстояния, на которых ток оказывается заметным, составляют единицы и десятки ангстрем. Аналогичный эффект наблюдается и при разделении электродов тонким слоем диэлектрика, например – оксида металла, образующего электроды.

Описанное явление лежит в основе работы *сканирующего туннельного микроскопа* (СТМ). Зонд в виде острого электрода подводится к поверхности на расстояние порядка ангстрема, и далее сканирование объекта может производиться двумя способами: в первом при движении зонда регистрируются изменения тока, связанные с изменением расстояния до поверхности, во втором – посредством специальной следящей системы поддерживается постоянный туннельный ток и расстояние от зонда до объекта. Это позволяет получить карту исследуемого объекта с разрешением вплоть до отдельных атомов. При подаче напряжения на зонд можно непосредственно манипулировать отдельными атомами и передвигать по поверхности подложки.

На рис. 21 показан яркий эксперимент, демонстрирующий возможности СТМ. Атомы железа на поверхности меди выстроены в замкнутую структуру, которая образует двумерную потенциальную яму для электронов – этот объект известен в литературе под названием «квантовый загон» (англ. *quantum corral*). На изображении видны волны внутри ограниченной области – так проявляют себя свободные электроны в меди, оказавшиеся внутри потенциальной ямы. Таким образом, СТМ стал первым прибором, который позволил визуализировать волны электронной плотности, предсказанные уравнением Шрёдингера.



**Рис. 21.** Последовательное формирование «квантового загона» круглой формы на поверхности меди из атомов железа<sup>4</sup>

В дополнение рассмотрим предельный случай рассеяния частицы на *полупроницаемой перегородке* – бесконечно тонком барьере, потенциал которого описывается дельта-функцией Дирака:

$$U(x) = U_0 \delta(x - a). \quad (3.47)$$

Прежде всего, необходимо получить граничные условия. Волновая функция непрерывна:

$$\psi(a + 0) = \psi(a - 0), \quad (3.48)$$

---

<sup>4</sup> Crommie M.F., Lutz C.P., Eigler D.M. Confinement of electrons to quantum corrals on a metal surface. *Science*, 1993, V. 262 (5131), pp. 218–220.

но для её производной непрерывность не выполняется – она испытывает скачок. Найдём его величину, проинтегрировав уравнение Шрёдингера

$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0\delta(x-a))\psi = 0 \quad (3.49)$$

на интервале  $[a-\varepsilon, a+\varepsilon]$  :

$$\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} dx \psi'' + \frac{2m}{\hbar^2} E \int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} dx \psi - \frac{2m}{\hbar^2} U_0 \int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} dx \delta(x-a)\psi = 0 \quad (3.50)$$

и рассмотрим интегралы по отдельности, переходя к пределу  $\varepsilon \rightarrow 0$ . Первый интеграл равен скачку производной волновой функции:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} dx \psi'' = \psi'(a+0) - \psi'(a-0).$$

Второе слагаемое равно нулю, так как оно является интегралом от непрерывной функции с одинаковым верхним и нижним пределами. Наконец, третий интеграл определяется основным свойством дельта-функции и не зависит от величины параметра  $\varepsilon$ :

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} dx \delta(x-a)\psi = \psi(a).$$

Таким образом, из (3.50) получаем:

$$\psi'(a+0) - \psi'(a-0) = \frac{2m}{\hbar^2} U_0 \psi(a). \quad (3.51)$$

Это и есть искомое граничное условие для производной волновой функции на дельтаобразном барьере.

Перейдём теперь к решению задачи о рассеянии на таком барьере. Для удобства привяжем начало координат к барьеру ( $a = 0$ ). Пусть частица налетает на него слева. На всей действительной оси решение можно представить в форме суперпозиции двух бегущих волн:

$$\psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}.$$

Нормируя падающую волну на единицу ( $A = 1$ ), решение можно записать в таком виде:

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + Be^{-ikx}, & x < 0, \\ (1+C)e^{ikx}, & x > 0. \end{cases} \quad (3.52)$$

$B$  и  $F$  приобретают смысл амплитуд прохождения и рассеяния. Уравнения для них определяются граничными условиями (3.48) и (3.51):

$$\begin{aligned} B &= C, \\ ik(1+C) - ik(1-B) &= \frac{2m}{\hbar^2}U_0(1+B). \end{aligned} \quad (3.53)$$

Отсюда находим:

$$B = C = \frac{mU_0}{ik\hbar^2 - mU_0}. \quad (3.54)$$

В решении (3.52) присутствует три волны – падающая волна единичной интенсивности ( $A = 1$ ), отражённая с интенсивностью  $|B|^2$  и прошедшая интенсивностью  $|1+C|^2$ :

$$|B|^2 = \frac{(mU_0)^2}{\hbar^2k^2 + (mU_0)^2}, \quad |1+C|^2 = \frac{\hbar^2k^2}{\hbar^2k^2 + (mU_0)^2}.$$

Основной особенностью полупроницаемой перегородки является равенство амплитуд рассеяния вперёд и назад (3.54).

### 3.6. Рассеяние на потенциальной яме

Рассмотрим движение частицы, пролетающей над потенциальной ямой глубиной  $U_0$  (рис. 22, а). В противоположность пребыванию частицы внутри ямы ( $E < 0$ ), где реализуется дискретный набор энергетических уровней и собственных функций (см. п. 4.3), при пролёте частицы над ямой ( $E > 0$ ) спектр энергии непрерывен, поскольку движение инфинитно.

Полное решение задачи о рассеянии на яме аналогично представленному выше описанию туннельного эффекта. Конечные результаты могут быть получены из решения задачи о туннельном эффекте заменой  $k \leftrightarrow \kappa$  и модификациями этих обозначений:

$$\kappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E, \quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E + U_0).$$

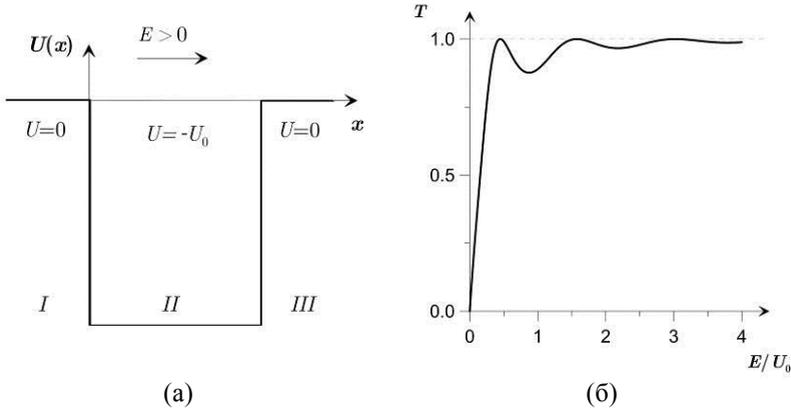


Рис. 22. Рассеяние на потенциальной яме конечной глубины: а) – пролёт частицы над ямой; б) – зависимость коэффициента прохождения  $T$  от энергии налетающей частицы

Коэффициенты прохождения и отражения получаются из (3.44). Они равны:

$$R = \frac{U_0^2 \sin^2 ka}{4E(U_0 + E) + U_0^2 \sin^2 ka}, \quad (3.55)$$

$$T = \frac{4E(U_0 + E)}{4E(U_0 + E) + U_0^2 \sin^2 ka}.$$

Здесь также проявляется неклассический эффект – несмотря на то, что энергия частицы выше верхней границы ямы, частица с ненулевой вероятностью может отразиться обратно. Кроме того, при некоторых значениях энергии потенциальная яма не оказывает на частицу никакого влияния, подобно эффекту Рамзауэра

для потенциального барьера. Именно, коэффициент прохождения равен единице при энергиях частицы (см. (3.55)):

$$E = U_0 + \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\pi}{a} \left( n + \frac{1}{2} \right) \right)^2, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.56)$$

Результат расчёта коэффициента  $T$  для рассеяния на яме шириной  $a = 4 \text{ \AA}$  и глубиной  $U_0 = 15 \text{ эВ}$  показан на рис. 22, б.

### 3.7. Барьер произвольной формы. Формула Гамова

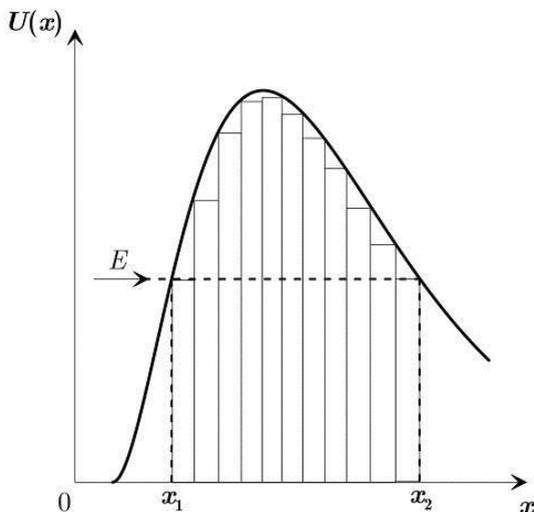
Полученный выше результат для коэффициента прохождения частицы через прямоугольный потенциальный барьер может быть применён к вычислению  $T$  для потенциала произвольной формы (рис. 23). Ширина барьера для частицы с энергией  $E$  определяется расстоянием между точками  $x_1$  и  $x_2$ , в которых  $E = U(x)$ . Множитель  $E(U_0 - E) / U_0^2$  в (3.43) меняется медленно и имеет величину порядка единицы. Соответственно, основная зависимость коэффициента прохождения определяется экспонентой:

$$T \approx \exp(-2\kappa a) \approx \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \sqrt{8m(U_0 - E)} a\right). \quad (3.57)$$

Разбивая весь барьер на узкие интервалы, в пределах каждого из которых можно считать барьер прямоугольным, можно представить полный коэффициент прохождения как произведение  $T_i$  для отдельных интервалов:

$$T = \prod_i T_i \approx \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \sum_i \sqrt{8m(U(x_i) - E)} \Delta x_i\right).$$

Здесь также пренебрегли зависимостью множителя перед экспонентой от координаты.



**Рис. 23.** Туннелирование частицы через барьер произвольной формы

Наконец, переходя к интегрированию, получаем выражение для оценки коэффициента прохождения:

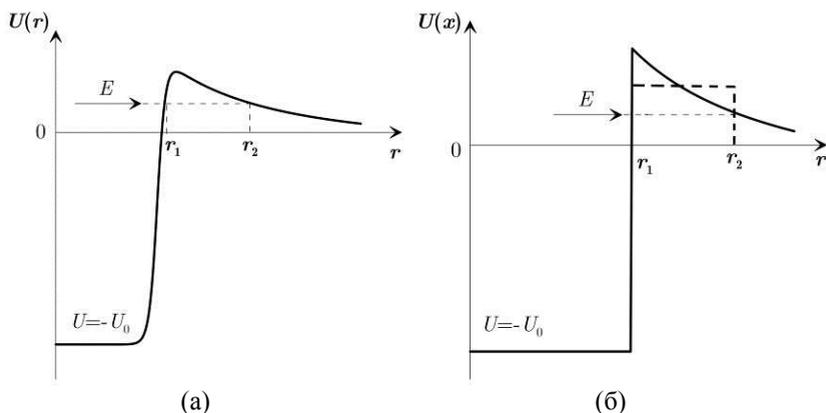
$$T \approx \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{8m(U(x) - E)} dx\right). \quad (3.58)$$

Полученный результат известен как *формула Гамова*. Она позволяет качественно определить вероятность прохождения частицы через потенциальный барьер для произвольного медленно меняющегося потенциала.

### 3.8. Альфа-распад

Альфа-частица ( $\alpha$ -частица) – положительно заряженная частица, состоящая из двух протонов и двух нейтронов, фактически – ядро атома гелия. В рамках простейшей модели,  $\alpha$ -частицы образуются спонтанно внутри ядер и удерживаются в нем посредством сильных взаимодействий (глубина потенциальной ямы – 10–20 МэВ). Однако уже на расстояниях порядка  $10^{-12}$  см ядерные взаимодействия почти исчезают, а электриче-

ские по-прежнему сильны, и поэтому частицы могут вылететь из ядра за счёт электростатического отталкивания при переходе через потенциальный барьер, образованный наложением ядерных сил притяжения и кулоновского отталкивания протонов в ядре (рис. 24, а) – происходит  $\alpha$ -распад ядра. Для урана этот процесс является основным механизмом радиоактивного распада. Моделью такого потенциала может служить упрощённая схема с прямоугольным потенциалом, представленная на рис. 24, б штриховой линией.



**Рис. 24. Эффективный потенциал сильного взаимодействия (притяжения) и кулоновского отталкивания в ядре атома: а) – схематическая реальная зависимость; б) – упрощённые модельные потенциалы**

«Запертая» внутри ядра виртуальная  $\alpha$ -частица имеет малую вероятность преодолеть потенциальный барьер. Энергия  $\alpha$ -частицы внутри ядра, равная энергии покоя  $4m_N c^2 \approx 4 \text{ ГэВ}$  ( $m_N$  – масса нуклона) плюс кинетической энергии, ниже высоты потенциального барьера. Оценкой для ширины барьера может быть  $a = r_2 - r_1 \approx 3 \cdot 10^{-12} \text{ см}$ .

Найдём коэффициент прохождения, используя формулу Гамова (3.58) и прямоугольный потенциал (штриховая линия на рис. 24, б). Для широкого барьера, вероятность прохождения через который очень мала, выражение упрощается до

$$T \approx \exp\left(-\frac{\sqrt{8m(U_0 + E)a}}{\hbar}\right) \equiv e^{-2\kappa a}.$$

Константа перед экспонентой порядка единицы. Оценим величину  $2\kappa a$ , положив  $U_0 + E \approx 11$  МэВ:

$$2\kappa a = \frac{\sqrt{8mc^2(U_0 + E)}}{c\hbar} a \approx \frac{\sqrt{8 \cdot 4 \cdot 10^9 \cdot 11 \cdot 10^6}}{3 \cdot 10^{10} \cdot 1.05 \cdot 10^{-27}} \cdot 1.6 \cdot 10^{-12} \cdot 3 \cdot 10^{-12} \approx 90.$$

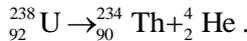
Таким образом, коэффициент прохождения составляет  $T \sim e^{-90}$  – это ничтожно малая величина.

Однако, найдём вероятность вылета  $\alpha$ -частицы из ядра за 1 секунду. При данной энергии оценка скорости движения  $\alpha$ -частицы внутри ядра дает  $10^9$  см/с. Это означает, что при радиусе ядра урана  $r_{\text{урана}} \sim 10^{-12}$  см,  $\alpha$ -частица «ударяется» о барьер примерно  $10^{21}$  раз в секунду. При каждом ударе вероятность пройти через барьер примерно  $T$ , тогда вероятность выхода  $\alpha$ -частицы из ядра в течение секунды:

$$W \sim 10^{21} \cdot e^{-90} \text{с}^{-1} = 10^{-18} \text{с}^{-1} = 10^{-11} \text{год}^{-1}.$$

Соответственно, время жизни ядра  $\tau_{\text{жизни}} \sim 10^{11}$  лет. Это довольно грубая оценка. Реальная задача – трёхмерная,  $\alpha$ -частица обладает орбитальным моментом, и поэтому нужно учесть центробежную потенциальную энергию. Более аккуратный расчёт даёт период полураспада  $T_{1/2} = 4.47 \cdot 10^9$  лет.

Интересно также оценить убыль ядер в 1 г  ${}_{92}^{238}\text{U}$  при  $\alpha$ -распаде, например, за 1 миллиард лет:



В одном грамме урана содержится

$$N_0 = \frac{m}{A} N_A = \frac{1 \text{ г}}{238} \cdot 6 \cdot 10^{23} \text{ моль}^{-1} = 2.5 \cdot 10^{21} \text{ ядер}.$$

Через время  $t$  число оставшихся ядер

$$N = N_0 e^{-\lambda t},$$

где  $\lambda = \frac{\ln 2}{T_{1/2}} = \frac{0.69}{4.47 \cdot 10^9 \text{ лет}} = 0.15 \cdot 10^{-9} \text{ лет}^{-1}$ . Таким образом, число ядер, не распавшихся к моменту времени  $t$ :

$$N = 2.5 \cdot 10^{21} \cdot e^{-0.15 \cdot 10^{-9} \text{ лет}^{-1} \cdot 10^9 \text{ лет}} = 2.152 \cdot 10^{21} \text{ ядер.}$$

### 3.9. Холодная эмиссия электронов из металла

Ещё одним ярким проявлением туннельного эффекта является холодная эмиссия электронов, которая наблюдается при приложении к металлу сильного электрического поля (*автоэлектронная эмиссия*). В отсутствие поля потенциальную энергию вблизи поверхности металла можно приближённо описать потенциальной ступенькой. В разделе 4.4 было показано, что частице тем легче покинуть металл, чем выше её энергия.

Энергия электронов, которые образуют *электронный газ* внутри кристаллической решётки, подчиняется *распределению Ферми–Дирака* (рис. 25) Оно показывает, какая доля  $n$  от общего количество электронов обладает данной энергией  $\varepsilon$ :

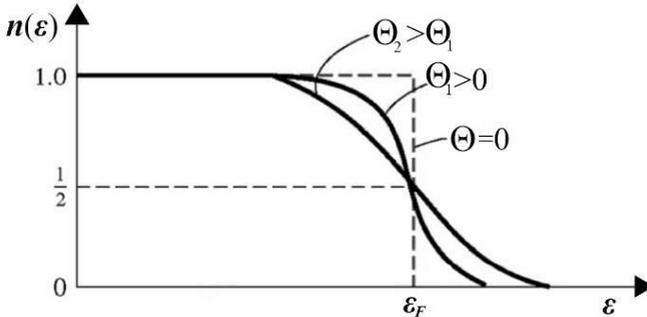
$$n(\varepsilon) = \left( \exp \left( \frac{\varepsilon - \varepsilon_F}{k_B \Theta} \right) + 1 \right)^{-1}. \quad (3.59)$$

Здесь  $k_B = 1.38 \cdot 10^{-16} \text{ эрг/К} \approx 8.62 \cdot 10^{-5} \text{ эВ/К}$  – постоянная Больцмана,  $\Theta$  – абсолютная температура, а  $\varepsilon_F$  – т.н. *энергия Ферми*. Это максимальная энергия, которую могут иметь электроны в идеальном электронном газе при абсолютном нуле температуры. Также энергия Ферми равна энергии, которую нужно затратить, чтобы добавить в систему ещё один электрон при  $\Theta = 0$ . Энергия Ферми определяет и работу выхода  $U_0$ :

$$U_0 \approx -\varepsilon_F.$$

В обычных условиях металл может покинуть только очень малая часть электронов, энергия которых превосходит работу выхода; при  $\Theta = 0$  таких частиц нет вовсе (см. рис. 25). Повы-

шение температуры приводит к росту средней энергии и значительно возрастает доля электронов, способных перейти во внешнюю среду – это явление носит название термоэлектронной эмиссии и широко используется в технике. В частности, большинство вакуумных радиоэлектронных ламп имеет накаливаемый катод, который испускает электроны в объём лампы благодаря своей высокой температуре.



**Рис. 25. Распределение Ферми–Дирака при различных температурах**

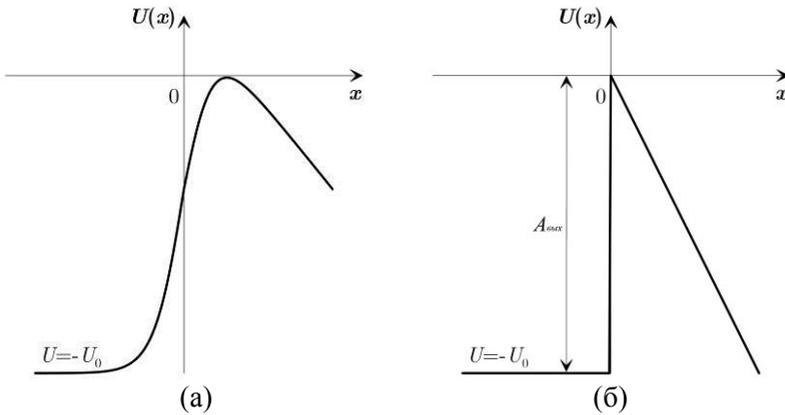
Однако можно обеспечить выход электронов проводимости из металла не только повышением их энергии, но и изменением формы и ширины потенциального барьера на границе. Наиболее просто это можно сделать, приложив электрическое поле напряжённостью  $\mathcal{E}$ , так что зависимость потенциальной энергии от координаты принимает вид, показанный на рис. 26, а. Чтобы упростить задачу, аппроксимируем его кусочно-линейной функцией (рис. 26, б):

$$U(x) = \begin{cases} -U_0, & x < 0, \\ -e\mathcal{E}x, & x > 0. \end{cases} \quad (3.60)$$

За нулевое значение энергии здесь принят потенциал на границе металла и вакуума. Из рис. 26, б ясно, что ширина барьера  $a$  для электрона с энергией  $-E$  составляет  $|E|/e\mathcal{E}$ . Тогда вычисление коэффициента прохождения (3.58) даёт:

$$T = \exp\left(-\frac{2}{3} \frac{\sqrt{8m|E|^3}}{\hbar e \mathcal{E}}\right). \quad (3.61)$$

Соответственно, если плотность тока подходящих к поверхности электронов  $j_0 = env$ , где  $e$ ,  $n$ ,  $v$  – заряд, концентрация и скорость вылетающих с поверхности электронов, то ток холодной эмиссии  $j$  пропорционален  $j_0 T$ . скорость определяется их тепловой энергией. Соотношение (3.61) для коэффициента прохождения известно под названием *уравнения Фаулера–Нордгейма*.



**Рис. 26. Потенциал на границе металла и вакуума при наложении электрического поля: а) схематический физический потенциал; б) кусочно-линейный модельный потенциал**

Автоэлектронная эмиссия при нормальной температуре проявляется только в очень сильных электрических полях – порядка  $10^7$ – $10^8$  В/см и более. Оценим коэффициент  $T$  для электронно-лучевой трубки, применяемой в аналоговых осциллографах, а также телевизионных приёмниках и компьютерных мониторах предыдущих поколений. Типичное расстояние от катода до экрана в ней около 25 см, а напряжение – 25 кВ. Соответственно, напряжённость электрического поля равна  $10^3$  В/см, и автоэлектронная эмиссия не может использоваться в работе электронно-лучевых трубок и радиоламп.

Поэтому электроны в большинстве вакуумных приборов испускаются катодом косвенного накала. Он представляет собой

металлический цилиндр, через который проходит нить накаливания, поддерживая температуру внешней поверхности 500–600°C. Поверхность цилиндра покрывается слоем элемента с низкой работой выхода. Обычно для этой цели применяется барий и его оксиды, как оптимальный по термостойкости материал – если покрыть катод, например, цезием, используемым в фотоэлементах (см. п. 1.1), то он расплавился бы при рабочей температуре. Работа выхода электронов из бария составляет 2.4 эВ.

Средняя энергия электрона в металле определяется термодинамическими законами и может быть оценена как

$$\varepsilon \sim k_B \Theta.$$

С учётом того, что потенциал внутри металла в рассматриваемой задаче оказывается отрицательным ввиду выбора его начала отсчёта, полная энергия электрона включает работу выхода  $U_0$ . В итоге энергия электрона отрицательна и равна

$$E = \varepsilon - U_0.$$

При температуре 300 К коэффициент прохождения для бария, рассчитанный в соответствии с (3.61), является ничтожно малой величиной  $T \sim e^{-250000} \sim 10^{-100000}$ , а разогрев катода до рабочих 900 К добавит к нему всего три порядка. Видно, что автоэлектронная эмиссия не связана с тепловыми эффектами. Если же увеличить напряжённость электрического поля до  $10^8$  В/см,  $T$  возрастает до 0.088, что уже может быть зарегистрировано приборами. Таких напряжённостей на практике удаётся достичь, используя тонкие заострённые электроды.

Холодная эмиссия нашла применение в технике автоэлектронной микроскопии, применяемой для исследования поверхностей проводящих материалов. Она обеспечивает разрешение в пределах 100 нм – 1 мкм. Важной особенностью автоэлектронной эмиссии является крайне узкий спектр энергии излучаемых электронов, что позволило создать высококачественные источники для формирования луча в электронных микроскопах.

Формула (3.61) описывает процесс холодной эмиссии лишь приближённо. В частности, она не учитывает притяжения, которое возникает между металлом и электроном по мере его

удаления от поверхности проводника. Этот эффект легче всего описать, пользуясь методом электрических изображений – поле свободного электрона влияет на оставшиеся в металле электроны проводимости так, что за счёт электростатических сил в ближайшей к свободной частице области электронная плотность уменьшается. В результате в данной точке возникает эффективный положительный заряд величиной  $+e$ , который и притягивает электрон обратно. Наконец, рассмотренная модель не учитывает шероховатости поверхности металла, которая может привести к большим локальным изменениям напряжённости поля. Поскольку она входит в показатель экспоненты в (3.61), это существенно изменяет величину коэффициента прохождения.

В свою очередь, для расчёта тока термоэлектронной эмиссии нужно найти из (3.59) долю электронов, энергия которых превышает работу выхода. Ток термоэлектронной эмиссии определяется уравнением, полученным экспериментально Ричардсоном в 1901 г., а детальную микроскопическую теорию термоэлектронной эмиссии в период 1910–30-х гг. разработали Зоммерфельд, Фаулер и Нордгейм. Они показали, что ток эмиссии определяется формулой:

$$j = \lambda_R \frac{mk_B^2 e}{2\pi^2 \hbar^3} \Theta^2 \exp\left(-\frac{U_0}{k_B \Theta}\right) = \lambda_R A \Theta^2 \exp\left(-\frac{U_0}{k_B \Theta}\right), \quad (3.62)$$

где  $\lambda_R$  – коэффициент порядка единицы, определяемый геометрией кристаллической решётки металла, постоянная  $A \approx 1.21 \cdot 10^6 \text{ A}/(\text{m}^2 \cdot \text{K}^2)$ . Применяя (3.62) расчёту плотности тока в электронно-лучевой трубке, при температуре 300 К получим  $j \approx 5.7 \cdot 10^{-29} \text{ A}/\text{m}^2$  – ток через трубку не идёт. При 900 К, напротив, плотность тока сравнительно велика –  $j \approx 3.7 \cdot 10^{-2} \text{ A}/\text{m}^2$ .

При высокой температуре катода и достаточной напряжённости поля равноценный вклад в плотность тока начинают вносить оба рассмотренных явления, что приводит к эффективному уменьшению работы выхода в (3.62) и росту максимально возможной плотности тока по сравнению с термоэлектронной эмиссией. В литературе этот феномен известен под названием *эффекта Шоттки*.

### 3.10. Периодический потенциал. Энергетические зоны. Зонная теория

В завершение изучения одномерного движения в системах с кусочно-постоянными потенциалами рассмотрим случай, когда потенциальная энергия является периодической функцией координаты. Пусть электрон движется в системе, состоящей из бесконечного количества барьеров высотой  $U_0$ , шириной  $a$  и разнесённых на расстояние  $b$  (рис. 27) – эта задача была исследована в работе Ральфа Кронига и Уильяма Пенни (1931), и в литературе часто называется *моделью Кронига–Пенни*.

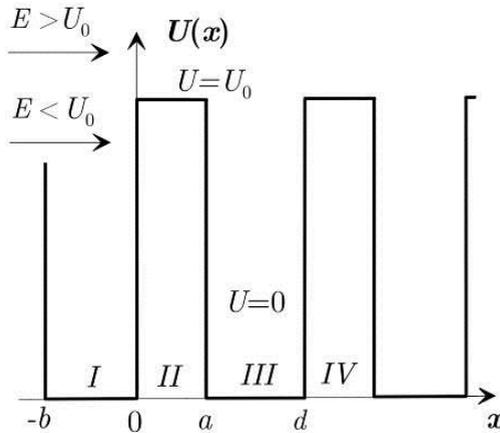


Рис. 27. Прямоугольная периодическая решётка

Потенциальная энергия имеет период  $d = a + b$ , т.е.  $U(x + d) = U(x)$ , следовательно, и решение уравнения Шрёдингера должно быть инвариантно при таком преобразовании. Линейность дифференциального уравнения приводит к условию периодичности для волновой функции:

$$\psi(x + nd) = C^n \psi(x), \quad (3.63)$$

где константа  $C$  – *фазовый множитель*. В физике твёрдого тела это условие, обобщённое на двумерное и трёхмерное пространство, является основой *теоремы Блоха*. В одномерном случае

оно также находит применение в механике, в частности – используется при построении теории параметрического резонанса, и известно также как *теорема Флокé*.

Нормировка волновой функции позволяет определить коэффициент  $C$ :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x+nd)|^2 dx = C |^{2n} \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = C |^{2n} = 1. \quad (3.64)$$

Таким образом,  $C$  можно представить как  $C = e^{i\varphi}$ , где  $\varphi$  – вещественная фаза.

Рассмотрим по отдельности случаи, когда энергия частицы меньше и больше высоты барьеров. При  $E > U_0$  введём стандартные обозначения:

$$\kappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0), \quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E.$$

Для областей I ( $-b < x < 0$ ) и II ( $0 < x < a$ ) решение уравнения Шрёдингера примет вид

$$\begin{aligned} \psi_I(x) &= Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \\ \psi_{II}(x) &= De^{i\kappa x} + Fe^{-i\kappa x}. \end{aligned}$$

Для перехода в области III ( $a < x < d$ ) и IV ( $d < x < a + d$ ) требуется сдвинуть начало отсчёта и учесть фазовый множитель:

$$\begin{aligned} \psi_{III}(x) &= (Ae^{ik(x-d)} + Be^{-ik(x-d)})e^{i\varphi}, \\ \psi_{IV}(x) &= (De^{i\kappa(x-d)} + Fe^{-i\kappa(x-d)})e^{i\varphi}. \end{aligned}$$

Ясно, что при замене  $x \rightarrow x + d$  согласно теореме Блоха выполняются соотношения  $\psi_{III}(x+d) = e^{i\varphi}\psi_I(x)$ ,  $\psi_{IV}(x+d) = e^{i\varphi}\psi_{II}(x)$ . Условия непрерывности волновой функции и производной в точках  $x = 0$  и  $x = a$  приводят к системе уравнений:

$$\begin{aligned}
(\psi_I)_{x=0} &= (\psi_{II})_{x=0}: A + B = D + F, \\
(\psi'_I)_{x=0} &= (\psi'_{II})_{x=0}: ik(A - B) = i\kappa(D - F), \\
(\psi_{II})_{x=a} &= (\psi_{III})_{x=a}: De^{ika} + Fe^{-ika} = (Ae^{-ikb} + Be^{ikb})e^{i\varphi}, \\
(\psi'_{II})_{x=a} &= (\psi'_{III})_{x=a}: i\kappa(De^{ika} - Fe^{-ika}) = ik(Ae^{-ikb} - Be^{ikb})e^{i\varphi},
\end{aligned} \tag{3.65}$$

которую удобно представить в матричном виде:

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ k & -k & -\kappa & \kappa \\ e^{i(\varphi-kb)} & e^{i(\varphi+kb)} & -e^{ika} & -e^{-ika} \\ \kappa e^{i(\varphi-kb)} & -\kappa e^{i(\varphi+kb)} & -\kappa e^{ika} & \kappa e^{-ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \\ D \\ F \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Эта система алгебраических линейных однородных уравнений имеет нетривиальное решение, только если её определитель равен нулю:

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ k & -k & -\kappa & \kappa \\ e^{i(\varphi-kb)} & e^{i(\varphi+kb)} & -e^{ika} & -e^{-ika} \\ \kappa e^{i(\varphi-kb)} & -\kappa e^{i(\varphi+kb)} & -\kappa e^{ika} & \kappa e^{-ika} \end{vmatrix} = 0.$$

Раскрывая определитель и группируя слагаемые, получим:

$$\begin{aligned}
4\kappa k(1 + e^{2i\varphi}) + e^{i(\varphi+kb)}((\kappa - k)^2 e^{-ika} - (\kappa + k)^2 e^{ika}) + \\
+ e^{i(\varphi-kb)}((\kappa - k)^2 e^{ika} - (\kappa + k)^2 e^{-ika}) = 0.
\end{aligned}$$

Для дальнейших преобразований удобно воспользоваться тем фактом, что для любого комплексного числа справедливо  $z + z^* = 2\operatorname{Re} z$ . Это даёт

$$4\kappa k(1 + e^{2i\varphi}) + 2e^{i\varphi} \operatorname{Re} \left\{ e^{ikb} \left( (\kappa - k)^2 e^{-ika} - (\kappa + k)^2 e^{ika} \right) \right\} = 0.$$

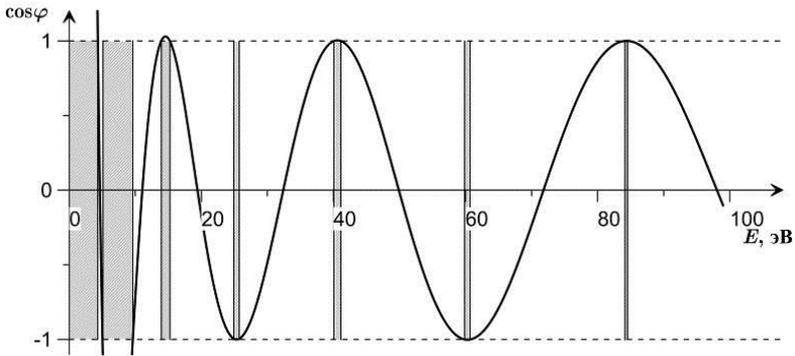
Деля это соотношение на  $8\kappa k e^{i\varphi}$ , и используя затем формулу Эйлера, получим соотношение, связывающее фазовый множитель и энергию частицы:

$$\cos \varphi = \cos kb \cos \kappa a - \frac{\kappa^2 + k^2}{2\kappa k} \sin kb \sin \kappa a. \quad (3.66)$$

В случае, когда энергия частицы ниже высоты барьеров, все предшествующие выкладки остаются в силе, достаточно произвести в них замену  $\kappa \rightarrow i\kappa$ . С учётом равенств  $\cos i\alpha = \operatorname{ch} \alpha$ ,  $\sin i\alpha = i \operatorname{sh} \alpha$ , в этом случае получим:

$$\cos \varphi = \cos kb \operatorname{ch} \kappa a + \frac{\kappa^2 - k^2}{2\kappa k} \sin kb \operatorname{sh} \kappa a. \quad (3.67)$$

Из (3.66) и (3.67) следует, что частица не может иметь любые значения энергии, поскольку левая часть имеет ограниченную область значений  $-1 \leq \cos \varphi \leq 1$ . Таким, образом, заменяя слева  $\cos \varphi$  на  $\pm 1$  и решая численно эти уравнения для энергии частицы  $E$ , можно найти границы запрещённых зон в одномерной прямоугольной решётке.



**Рис. 28.** Структура запрещённых и разрешённых энергетических зон электрона в одномерном периодическом потенциале. Сплошная линия показывает значение правой части уравнения (3.66). Области запрещённых состояний заштрихованы

В качестве примера возьмем  $U_0$  равным первой потенциальной энергии ионизации атома,  $a$  – период кристаллической решётки,  $b$  – радиус атома. Например, для железа оценками могут служить значения:  $U_0 \approx 7.87$  эВ,  $a \approx 2.87$  Å,  $b \approx 1.26$  Å. Полученная для таких параметров зависимость  $\cos \varphi$  от энергии элек-

трона представлена на рис. 28. Как видно из диаграммы, ширина разрешённых зон увеличивается с ростом энергии. По мере этого энергетический спектр электронов приближается к непрерывному, но никогда с ним полностью не совпадает, поскольку в спектре остаются узкие запрещённые зоны.

В основополагающей работе Кронига и Пенни<sup>5</sup> рассматривалось также движение электрона в т.н. «*гребёнке Дирака*» – периодической цепочке потенциальных барьеров, заданных дельта-функциями:

$$U(x) = U_0 \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(x + na). \quad (3.68)$$

Такая решётка получается из рассмотренной выше в пределе  $b \rightarrow 0$ . В этом случае также справедлива теорема Блоха и реализуются энергетические зоны, однако в целом расчёт несколько упрощается за счёт сокращения числа областей, в которых нужно «сшивать» волновые функции электрона. Рассмотрим задачу подробнее.

Фундаментальное решение уравнения Шрёдингера по-прежнему имеет вид бегущей волны. На интервале  $[0, a]$  существует решение

$$\psi_I = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}. \quad (3.69)$$

На соседнем интервале  $[a, 2a]$  по теореме Блоха получаем:

$$\psi_{II} = e^{i\varphi} \left( Ae^{ik(x-a)} + Be^{-ik(x-a)} \right). \quad (3.70)$$

При  $x=a$  должны быть выполнены граничные условия (3.48) и (3.51) для полупроницаемой перегородки, выведенные ранее. Их применение даёт однородную систему уравнений для амплитуд волновых функций  $A$  и  $B$ :

$$\begin{aligned} (e^{ika} - e^{i\varphi})A + (e^{-ika} - e^{i\varphi})B &= 0, \\ (ike^{i\varphi} - (ik + 2u)e^{ika})A - (ike^{i\varphi} - (ik - 2u)e^{-ika})B &= 0, \end{aligned} \quad (3.71)$$

---

<sup>5</sup> Kronig R. de L., Penney W.G. Quantum mechanics of electrons in crystal lattices. Proceedings of the Royal Society of London. Series A, 1931, V. 130, pp. 499–513.

где  $u = mU_0 / \hbar^2$ . Определитель системы (3.70) должен обращаться в нуль. Последовательное вычисление определителя приводит к соотношению, подобному (3.65) и (3.66):

$$\cos \varphi = \cos ka + \frac{u}{k} \sin ka. \quad (3.72)$$

Соответственно, границы запрещённых энергетических зон определяются уравнением

$$\cos ka + \frac{u}{k} \sin ka = \pm 1.$$

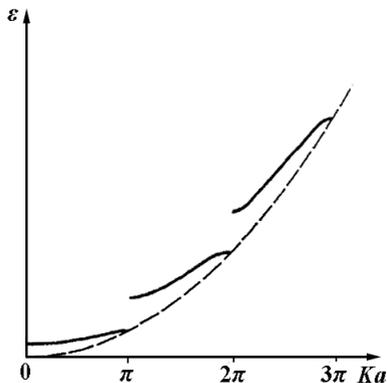
Все верхние границы разрешённых зон определяются условием  $ka = \pi n$ , поскольку при этом синус в уравнении равен нулю.

На рис. 29 показана зависимость энергии электрона в дираковской решётке от переменной  $\varphi$  в сравнении с энергией свободной частицы. Фаза здесь переписана в форме

$$\varphi = Ka,$$

где  $K$  – т.н. *вектор обратной решётки*. Обратная решётка представляет собой пространственное Фурье-преобразование исходной кристаллической решётки, это означает, что векторы обратной решётки являются волновыми векторами электронов, определяющими их импульсы согласно соотношению (1.10).

В пределе малых значений потенциала  $U_0 = 0$  запрещённые зоны исчезают. При этом мы переходим к движению свободной частицы, которому отвечает непрерывный спектр значений энергии. Напротив, при  $U_0 \rightarrow \infty$  ширина запрещённых зон уменьшается, и они вырождаются в дискретные уровни энергии, соответствующие  $ka = \pi n$ . В таком случае потенциальные барьеры полностью изолируют отдельные области пространства друг от друга, и электроны ведут себя как в бесконечно глубоких несвязанных потенциальных ямах.



**Рис. 29.** Зависимость энергии электронов от величины их импульса в решётке Дирака. Штриховая линия – зависимость энергии свободной частицы

Задача о периодическом потенциале является промежуточным случаем между финитным и инфинитным движением. Соответственно, в системе возникают не дискретные уровни энергии, а широкие зоны, в пределах которых энергия частицы может принимать любые значения. Такая модель качественно описывает движение электрона в кристалле. Развитие *зонной теории* позволило объяснить электронные свойства металлов, полупроводников и диэлектриков.

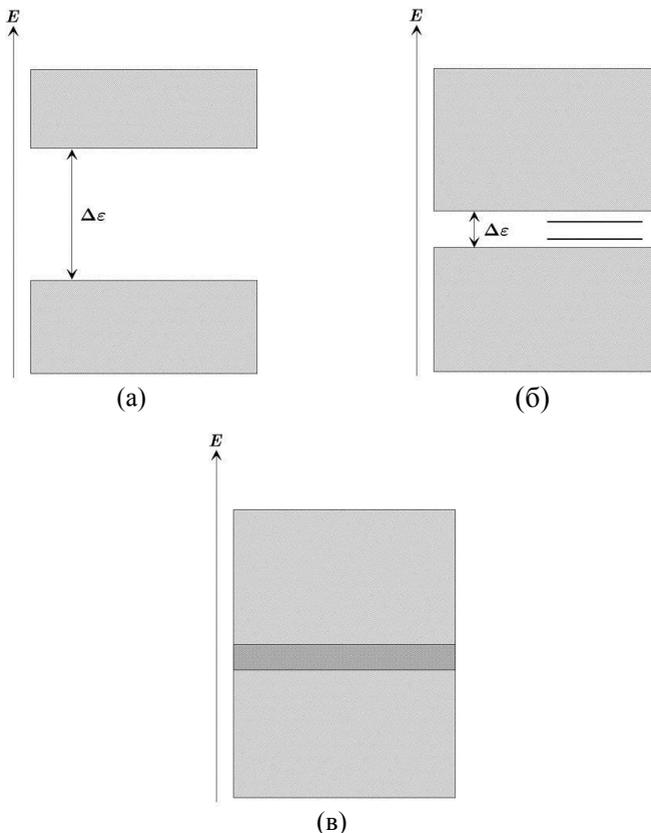
В потенциальной яме (см. п. 4.3) уровни энергии невырожденные. Если сближать несколько ям, так что волновые функции электронов во внешних областях станут перекрываться друг с другом, происходит смещение и расщепление уровней энергии благодаря их взаимодействию. В системе из  $N$  ям каждый уровень расщепляется на  $N$  новых уровней, и при очень большом значении  $N$ , характерном для числа атомов в кристаллах (величина порядка числа Авогадро,  $N \sim 10^{23}$ ), расстояние между уровнями становится чрезвычайно малым, так что для переходов между ними требуется очень малая энергия. Поэтому спектр энергии в пределах зон можно считать непрерывным. Тем не менее, уровни оказываются разделёнными зонами запрещённых состояний.

Электроны являются *фермионами* – каждое квантовое состояние может занимать только одна частица. Поэтому в кристаллической решётке могут они вести себя по-разному в зависимости от заполненности состояний в энергетических зонах. Если в данной энергетической зоне заполнены все состояния, то возможны переходы только в соседние энергетические зоны, при условии, что сообщённая электронам энергия достаточна для преодоления интервала запрещённых состояний. Напротив, при наличии свободных состояний в пределах зоны электроны легко переходят на более высокие уровни. Если обеспечить постоянное удаление их с этих уровней и добавить в систему источник энергии, то процесс можно сделать непрерывным – возникает электрический ток.

Наибольший вклад в электропроводные свойства материалов вносят *валентные* электроны, расположенные на внешних оболочках атомов. В основном состоянии валентные электроны заполняют все низшие энергетические состояния и пребывают в *основной* энергетической зоне. Ближайшая к ней отдельная энергетическая зона в диэлектриках и полупроводниках, отделённая запрещённым интервалом энергии  $\Delta\varepsilon$ , называется *зоной проводимости*, а сама основная зона – *валентной зоной*.

Если *ширина запрещённой зоны*  $\Delta\varepsilon$  велика, то для её преодоления требуется передать электрону сравнительно большую энергию. В результате такой материал слабо подвержен влиянию приложенного электрического поля и является *диэлектриком* (рис. 30, а). Обычно принято считать материал диэлектриком, если  $\Delta\varepsilon > 5$  эВ. В частности, для алмаза  $\Delta\varepsilon \approx 5.5$  эВ, для диоксида кремния  $\text{SiO}_2$  –  $\Delta\varepsilon \approx 9$  эВ.

При малой ширине запрещённой зоны возможен переход между зонами при относительно небольшой сообщённой электрону энергии, и материал в обычном состоянии обладает высоким электрическим сопротивлением, но проводит ток при повышении энергии (приложении напряжения, увеличении температуры). Такие материалы называются *полупроводниками*.



**Рис. 30. Зонная структура различных материалов. Нижняя зона – валентная, верхняя – зона проводимости: а) – диэлектрик, широкая запрещённая зона; б) – полупроводник с примесными уровнями, в) – металл, энергетические зоны перекрываются**

Граница между полупроводниками и диэлектриками достаточно условна, и принято классифицировать материал как полупроводник, если  $\Delta\varepsilon$  лежит в интервале от 0.5 до 5 эВ (рис. 30, б). Например, при комнатной температуре для кремния  $\Delta\varepsilon \approx 1.2$  эВ, для германия –  $\Delta\varepsilon \approx 0.67$  эВ, для арсенида галлия GaAs –  $\Delta\varepsilon \approx 1.43$  эВ. Ширина запрещённой зоны при изменении температуры обычно меняется незначительно:

$$\Delta\varepsilon(\Theta) = \Delta\varepsilon(0) - \frac{\alpha\Theta^2}{\Theta + \beta},$$

где  $\alpha$  и  $\beta$  – эмпирические постоянные для данного материала.

Свойствами полупроводников можно управлять введением *примесных атомов* в сравнительно малой концентрации. Их перераспределение по кристаллической решётке формирует дополнительные энергетические уровни в пределах запрещённой зоны, что облегчает переход электронов из валентной зоны в зону проводимости.

Отличительной особенностью металлов является слабая связь валентных электронов с атомами, так что кристаллическая решётка металла представляет собой ионный остов, погружённый в электронный газ (точнее, *квантовую жидкость*). В результате у металлов запрещённая зона отсутствует, поскольку валентная зона и зона проводимости сливаются – фактически, существует одна незаполненная энергетическая зона (рис. 30, в). Поэтому здесь легко обеспечить переход электронов на высшие уровни, что и обуславливает высокую проводимость металлов.

Точные количественные расчёты зонной структуры различных материалов практически невозможны, потому что, прежде всего, неизвестно точное выражение для периодического потенциала  $U(x)$ , задание которого в расчётах производится на основе аппроксимации экспериментальных данных. Этот факт поспособствовал развитию множества приближённых аналитических и численных методов, нашедших впоследствии применение и за пределами теории электропроводности.

## 4. КВАНТОВЫЙ ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР

### 4.1. Частица в параболическом потенциале.

#### Полиномы Эрмита

Рассмотрим одномерное движение частицы с массой  $m$  в потенциальной яме, соответствующей классическому гармоническому осциллятору:  $U = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$ . Модели на основе такого потенциала очень полезны в квантовой механике и нашли широкое применение в физике конденсированного состояния и квантовой теории поля.

Решим стационарное уравнение Шредингера с этим потенциалом:

$$\psi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E - \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right) \psi(x) = 0. \quad (4.1)$$

Начнём с введения безразмерных переменных для длины и энергии:

$$z = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \equiv \alpha x, \quad \lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}. \quad (4.2)$$

В этих переменных уравнение для  $\psi(z)$  принимает вид:

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} + (\lambda - z^2)\psi = 0. \quad (4.3)$$

Очевидно, что при конечной энергии осциллятор не может бесконечно удаляться от положения равновесия, откуда следует условие

$$\psi(z \rightarrow \pm\infty) = 0.$$

Легко проверить, что волновая функция при  $z \rightarrow \pm\infty$  (когда в уравнении (4.3) можно пренебречь  $\lambda$ ) ведёт себя как  $e^{-z^2/2}$ . Тогда для произвольных значений  $z$  функцию  $\psi(z)$  будем искать в виде

$$\psi = f(z)e^{-z^2/2}, \quad (4.4)$$

где  $f(z)$  – некоторая неизвестная пока функция. Подстановка выражения (4.4) в уравнение (4.3) приводит к уравнению для  $f(z)$ :

$$f'' - 2zf' + (\lambda - 1)f = 0. \quad (4.5)$$

Решим это уравнение, разложив функцию  $f(z)$  в степенной ряд:

$$f(z) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k z^k. \quad (4.6)$$

Тогда

$$\begin{aligned} f'(z) &= \sum_{k=1} k a_k z^{k-1} = \sum_{k=0} k a_k z^{k-1}, \\ f''(z) &= \sum_{k=2} k(k-1) a_k z^{k-2} = \sum_{k=0} (k+2)(k+1) a_{k+2} z^k. \end{aligned}$$

Подставив в (4.6) получим

$$\sum_{k=0}^{\infty} [(k+2)(k+1) a_{k+2} - 2k a_k + (\lambda - 1) a_k] z^k = 0.$$

Это равенство может выполняться при всех значениях  $z$ , только если коэффициенты ряда при всех степенях  $z^k$  равны нулю, откуда следует рекуррентная формула:

$$a_{k+2} = a_k \frac{2k+1-\lambda}{(k+2)(k+1)}. \quad (4.7)$$

Ряд  $f(z) = \sum_{k=1} a_k z^k$  с коэффициентами, удовлетворяющими соотношению (4.7), сходится, т.к.

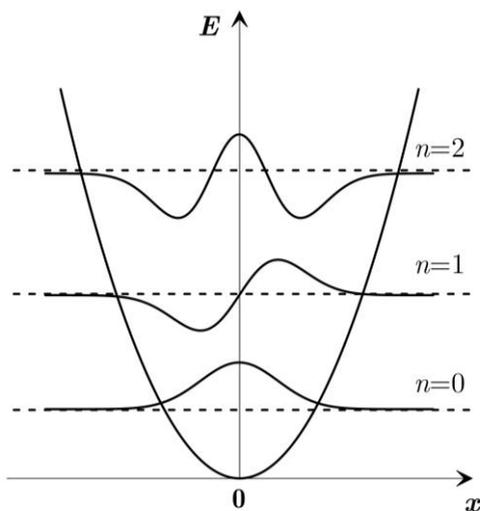
$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{a_{k+2}}{a_k} = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{2}{k} = 0.$$

Однако при отношении коэффициентов  $a_{k+2} / a_k \approx 2/k$  ряд сходится к функции, растущей при больших  $z$  быстрее, чем  $e^{z^2/2}$  (коэффициенты разложения в ряд Маклорена  $e^{z^2/2}$  при  $k \rightarrow \infty$  относятся как  $a_{k+2} / a_k \approx 1/k$ ). Таким образом,

$\psi = f(z)e^{-z^2/2}$  расходится при больших  $z$ . Устранить это противоречие можно, оборвав ряд (4.6), превратив его в полином.

Пусть  $n$  – степень полинома, т.е.  $a_n \neq 0$ , а  $a_{n+2} = 0$  (из (4.7) следует, что и все последующие коэффициенты равны нулю) – для этого должно выполняться равенство  $\lambda = 2n + 1$ . Учитывая, что  $\lambda = 2E / \hbar\omega$ , получаем спектр энергии осциллятора (рис. 31):

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right). \quad (4.8)$$



**Рис. 31. Параболический потенциал, уровни энергии и волновые функции трёх низших энергетических состояний квантового гармонического осциллятора**

Отметим основные свойства получившегося результата:

- 1) спектр энергии эквидистантен:

$$\Delta E = E_{n'} - E_n = \hbar\omega;$$

- 2) энергия основного состояния с  $n = 0$  не равна нулю:

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

Т.е. частица в основном состоянии совершает т.н. *нулевые колебания* вблизи минимума потенциала. Этот результат кажется парадоксальным, но находится в полном согласии с принципом неопределённости – энергия  $E_0 = 0$  означала бы, что импульс и координата частицы одновременно имеют нулевые, т.е. точно определённые, значения.

Энергию нулевых колебаний можно оценить, исходя из принципа неопределённости. Примем, что частица совершает движение на отрезке от  $-a/2$  до  $a/2$ . Тогда неопределённость координаты  $\Delta x \sim a$ . Неопределённость импульса, соответственно,  $\Delta p \sim \hbar / (2\Delta x) \sim \hbar / 2a$ . Полная энергия электрона:

$$E(a) \sim \frac{1}{2m} \left( \frac{\hbar}{2a} \right)^2 + \frac{m\omega^2 a^2}{2}.$$

Минимизируя эту функцию, получим оценку для наиболее вероятного значения координаты электрона и соответствующую ему энергию:

$$\left. \frac{dE}{da} \right|_{a=a_0} = 0 \sim m\omega^2 a_0 - \frac{\hbar^2}{4ma_0^3},$$

отсюда находим:  $a_0 = \sqrt{\hbar / 2m\omega}$ , и  $E(a_0) \sim \hbar\omega / 2$ .

Нулевые колебания проявляются в различных ситуациях. Например, гелий при обычном давлении благодаря высокой энергии нулевых колебаний остаётся жидким даже при температурах ниже 1 мК. Эксперименты показали, что атомы гелия могут сформировать кристаллическую решётку только при давлениях выше 2.5 МПа.

В квантовой теории поля основное состояние, в котором все квантовые числа равны нулю, называется *физическим вакуумом*, в котором в результате действия нулевых колебаний происходит непрерывное рождение и уничтожение пар частица–античастица (т.н. *виртуальные частицы*). Существование физического вакуума подтверждено, в частности, наблюдениями и измерениями *эффекта Казимира* – два незаряженных проводящих тела на близком расстоянии в вакууме начинают притяги-

ваться друг к другу, т.к. между ними вероятность рождения пар уменьшается, поскольку во внутренней области реализуются только дискретные уровни энергии. Другим наблюдаемым эффектом, который связан с физическим вакуумом, является *лэмбовский сдвиг* энергетических уровней в атомах водорода и водородоподобных ионах, открытый в 1947 г. Уиллисом Лэмбом и Робертом Резерфордом. Детальное описание этих явлений даёт-ся в рамках квантовой электродинамики.

Найдём явный вид волновых функций гармонического осциллятора. Для  $n$ -го энергетического состояния:

$$\psi(z) = e^{-z^2/2} \sum_k^n a_k z^k, \quad (4.9)$$

где  $z = \alpha x$ . Из соотношения (4.7) ясно, что полином (4.9) либо *чётный* – в этом случае суммирование в (4.9) начинается с  $k = 0$ , либо *нечётный* – суммирование в (4.9) начнётся с  $k = 1$ .

Найдём несколько первых волновых функций (рис. 31).

1)  $n = 0$ . Тогда  $a_0 \neq 0$ ,  $a_2$  и все последующие коэффициенты равны нулю. Получаем:

$$\lambda = 2n + 1 = 1, \quad \psi_0 = a_0 e^{-z^2/2}.$$

Применим условие нормировки волновой функции для вычисления  $a_0$ :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_0|^2 dz = a_0^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-z^2} dz = a_0^2 \pi^{1/2} = 1,$$

$$a_0 = \pi^{-1/4}.$$

Таким образом,

$$\psi_0(z) = \pi^{-1/4} e^{-z^2/2}. \quad (4.10)$$

2)  $n = 1$ , т.е.  $a_1 \neq 0$ ,  $a_3 = a_5 = \dots = 0$ . Здесь  $\lambda = 3$ , тогда

$$\psi_1 = a_1 z e^{-z^2/2}.$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_1|^2 dz = a_1^2 \int_{-\infty}^{+\infty} z^2 e^{-z^2} dz = -a_1^2 \frac{\partial}{\partial \beta} \left( \int_{-\infty}^{+\infty} z^2 e^{-\beta z^2} dz \right) \Bigg|_{\beta=1} = \frac{a_1^2 \pi^{1/2}}{2} = 1,$$

$$a_1 = \sqrt{2\pi}^{-1/4}.$$

Таким образом, при  $n = 1$ :

$$\psi_1(z) = \sqrt{2\pi}^{-1/4} z e^{-z^2/2}. \quad (4.11)$$

3) При  $n = 2$ :

$$\psi_2 = (a_0 + a_2 z^2) e^{-z^2/2}.$$

Из (4.7) следует, что  $a_2 = -2a_0$ . Соответственно, в полиноме остаётся один неизвестный коэффициент, который определяется условием нормировки волновой функции:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_2|^2 dz = a_0^2 \int_{-\infty}^{+\infty} (1 - 2z^2)^2 e^{-z^2} dz = 2\pi^{1/2} a_0^2 = 1,$$

$$a_0 = \frac{\pi^{-1/4}}{\sqrt{2}},$$

$$\psi_2(z) = \frac{\pi^{-1/4}}{\sqrt{2}} (1 - 2z^2) e^{-z^2/2}. \quad (4.12)$$

Уравнение (4.5) для полиномиальной части волновой функции  $f(z)$  при  $\lambda - 1 = 2n$  называется *уравнением Эрмита*, а его решениями являются *полиномы Эрмита*, обозначаемые  $H_n(z)$ . Выше был описан способ их построения с помощью рекуррентного соотношения (4.5). В общем случае волновая функция квантового гармонического осциллятора может быть записана следующим образом:

$$\psi_n(z) = C_n H_n(z) e^{-z^2/2}, \quad (4.13)$$

где  $C_n$  определяется условием нормировки волновой функции. Полиномы Эрмита образуют полную ортогональную систему для всех значений  $z$  от  $-\infty$  до  $+\infty$ , и поэтому они могут быть использованы в качестве базисных для разложения произвольных функций.

Полиномы  $H_n(z)$  можно находить последовательным дифференцированием функции  $e^{-z^2/2}$ :

$$H_n(z) = (-1)^n e^{z^2} \frac{d^n}{dz^n} e^{-z^2}. \quad (4.14)$$

Для примера найдём три первых полинома:

$$H_0(z) = (-1)^0 e^{z^2} e^{-z^2} = 1,$$

$$H_1(z) = (-1)^1 e^{z^2} \frac{d}{dz} e^{-z^2} = 2z,$$

$$H_2(z) = (-1)^2 e^{z^2} \frac{d^2}{dz^2} e^{-z^2} = 4z^2 - 2.$$

Из (4.14) следует также, что полиномы связаны соотношением

$$\frac{d^m}{dz^m} H_n(z) = n(n-1)\dots(n-m+1)H_{n-m}(z). \quad (4.15)$$

Наконец, можно построить полиномы высших порядков, пользуясь рекуррентным соотношением:

$$H_n(z) - 2zH_{n-1}(z) + 2(n-1)H_{n-2}(z) = 0, \quad n \geq 2. \quad (4.16)$$

Полиномы Эрмита нормируются следующим образом:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} H_n(z)H_m(z)e^{-z^2} dz = 2^n n! \sqrt{\pi} \delta_{nm}. \quad (4.17)$$

Соответственно, нормировочный коэффициент волновой функции определяется как

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_n|^2 dz = C_n^2 \int_{-\infty}^{+\infty} H_n^2(z)e^{-z^2} dz = C_n^2 2^n n! \sqrt{\pi} = 1, \quad (4.18)$$

$$C_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \pi^{1/4}}},$$

Окончательный вид волновых функций гармонического осциллятора (в безразмерной и размерной форме):

$$\psi_n(z) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!} \pi^{1/4}} H_n(z) e^{-z^2/2},$$

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left( \frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{1/4} H_n \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}. \quad (4.19)$$

Нетрудно убедиться, что *средние значения* координаты и импульса частицы в параболическом потенциале равны нулю. Полиномы Эрмита, а вместе с ними и волновые функции, обладают определенной четностью, поэтому подынтегральное выражение для среднего значения координаты

$$\langle x \rangle_n = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n x \psi_n dx$$

является нечётным и интеграл, вычисляемый в симметричных пределах равен нулю, т.е.  $\langle x \rangle_n = 0$ .

Среднее значение импульса:

$$\langle p \rangle_n = -i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n \frac{d\psi_n}{dx} dx = 0$$

т.к. подынтегральная функция тоже нечетная.

В заключение рассмотрим ряд задач, связанных с гармоническим осциллятором, с примерами их решения.

1. Найти среднюю кинетическую энергию частицы, если ее полная энергия равна  $E = 5\hbar\omega / 2$ .

Эта энергия отвечает состоянию с  $n = 2$ . Средняя кинетическая и потенциальная энергии гармонического осциллятора равны между собой, поэтому

$$\langle U_n \rangle = \langle T_n \rangle = \frac{1}{2} E_n = \frac{5}{4} \hbar\omega.$$

2. Найти уровни энергии частицы в потенциальной яме, ограниченной с одной стороны вертикальной стенкой, а с другой – параболическим потенциалом:

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0, \\ \frac{kx^2}{2}, & x > 0. \end{cases}$$

В области  $x > 0$  справедливо уравнение Шрёдингера в параболическом потенциале (4.1), и, соответственно, его решение будет выражаться полиномами Эрмита  $\psi_n \sim H_n(\alpha x)$ . С другой стороны, в точке  $x = 0$  волновая функция должна принимать нулевое значение. Это возможно только для нечётных значений  $n = 2l+1$ . Поэтому уровни энергии частицы в такой потенциальной яме равны:

$$E_l = \hbar\omega \left( 2l + \frac{3}{2} \right), \quad l = 0, 1, 2, \dots$$

3. На находящуюся в параболическом потенциале частицу с электрическим зарядом  $e$  накладывается однородное электрическое поле напряжённостью  $\mathcal{E}$ . Определить уровни энергии частицы.

Потенциальная энергия заряженной частицы в электрическом поле равна  $-e\mathcal{E}x$ . Поэтому уравнение (4.1) принимает следующий вид:

$$\psi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E - \left( \frac{m\omega^2 x^2}{2} - e\mathcal{E}x \right) \right) \psi(x) = 0. \quad (4.20)$$

Выделим полный квадрат в потенциальной энергии:

$$\frac{m\omega^2 x^2}{2} - e\mathcal{E}x = \frac{m\omega^2}{2} \left( x - \frac{e\mathcal{E}}{m\omega^2} \right)^2 - \frac{e^2 \mathcal{E}^2}{2m\omega^2}.$$

Подставляя это выражение в (4.20) и заменив

$$x_1 = x - \frac{e\mathcal{E}}{m\omega^2}, \quad z = \alpha x_1, \quad E_1 = E + \frac{e^2 \mathcal{E}^2}{2m\omega^2},$$

приходим к уравнению гармонического осциллятора

$$\frac{d^2\psi(x_1)}{dx_1^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E_1 - \frac{m\omega^2 x_1^2}{2} \right) \psi(x_1) = 0,$$

решение которого мы уже нашли. Таким образом, в электрическом поле волновая функция сохраняет вид (4.13), но уровни энергии смещаются на одинаковую величину и принимают значения

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) - \frac{e^2 \mathcal{E}^2}{2m\omega^2}. \quad (4.21)$$

4. Две частицы равной массы  $m$  связаны струной с модулем упругости  $k_1$ . Каждая частица также связана с началом координат струной с модулем упругости  $k$ . Найти уровни энергии и волновую функцию системы.

Эту систему можно рассматривать как два независимых осциллятора. Один из них соответствует частице массой  $M = 2m$ , расположенной в центре масс  $X = (x_1 + x_2) / 2$  и движущейся относительно начала координат, а второй – частице с приведённой массой  $\mu = m / 2$ , которая движется возле центра масс системы  $X$  на расстоянии  $x = x_1 - x_2$  от него. Соответственно, уровни энергии будут суммой энергий двух осцилляторов:

$$E_{n_1 n_2} = \hbar\omega \left( n_1 + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega_1 \left( n_2 + \frac{1}{2} \right), \quad (4.22)$$

где  $\omega = \sqrt{\frac{2k}{M}}$  и  $\omega_1 = \sqrt{\frac{k + 2k_1}{2\mu}}$ , а волновая функция имеет вид

$$\psi_{n_1 n_2} = C_{n_1} C_{n_2} H_{n_1}(\xi) H_{n_2}(\eta) e^{-(\xi^2 + \eta^2)/2}. \quad (4.23)$$

Здесь введены безразмерные координаты  $\xi = \sqrt{\frac{M\omega}{\hbar}} X$  и

$\eta = \sqrt{\frac{\mu\omega_1}{\hbar}} x$ , а коэффициенты  $C_{n_1}$  и  $C_{n_2}$  определяются нормировкой полной волновой функции системы.

5. Проверить, что средние значения квадратов координаты и импульса равны

$$\langle x^2 \rangle_n = \frac{\hbar}{2m\omega}(2n+1),$$

$$\langle p^2 \rangle_n = \frac{m\hbar\omega}{2}(2n+1).$$

Видно, что выполняется

$$\langle x^2 \rangle_n \langle p^2 \rangle_n \geq \frac{\hbar^2}{4}.$$

Равенство отвечает состоянию с  $n = 0$ .

## 5. СФЕРИЧЕСКИ-СИММЕТРИЧНЫЕ ПОТЕНЦИАЛЫ

### 5.1. Уравнение Шрёдингера в сферических координатах

Важными для физических приложений являются задачи, в которых потенциальная энергия зависит только от расстояния до некоторого центра (начала координат):

$$U(x, y, z) = U(r), \quad r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}. \quad (5.1)$$

Для описания частицы в таком потенциале естественно перейти в сферические координаты:  $x = r \sin \theta \cos \varphi$ ,  $y = r \sin \theta \sin \varphi$ ,  $z = r \cos \theta$ ,  $0 \leq \theta \leq \pi$ ,  $0 \leq \varphi \leq 2\pi$ .

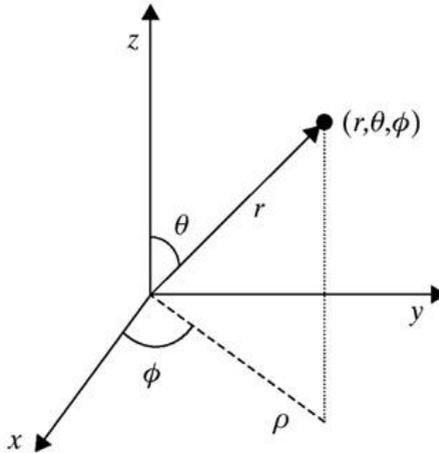


Рис. 32. Сферические и декартовы координаты

и решать стационарное уравнение Шрёдингера

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(r) \right) \psi(r, \theta, \varphi) = E \psi(r, \theta, \varphi). \quad (5.2)$$

Оператор Лапласа в сферических координатах

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \Delta_{\theta, \varphi} \equiv \Delta_r + \frac{1}{r^2} \Delta_{\theta, \varphi}, \quad (5.3)$$

где для краткости введено обозначение  $\Delta_{\theta,\varphi}$  для угловой части оператора Лапласа:

$$\Delta_{\theta,\varphi} = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}. \quad (5.4)$$

Удобно еще упростить запись этого выражения:

$$\Delta_{\theta,\varphi} \equiv \Delta_{\theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \Delta_{\varphi} \quad (5.5)$$

Перепишем уравнение (5.2) в виде:

$$\begin{aligned} \Delta \psi + k^2 \psi &= 0, \\ k^2 &= \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(r)). \end{aligned} \quad (5.6)$$

Уравнение (5.2) допускает разделение переменных, поэтому можно представить волновую функцию частицы в виде произведения:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y(\theta, \varphi). \quad (5.7)$$

Подставим  $\psi(r, \theta, \varphi)$  в уравнение (5.6) и с учетом (5.5) получим:

$$\left( \Delta_r + \frac{1}{r^2} \Delta_{\theta,\varphi} \right) RY + k^2 RY = 0. \quad (5.8)$$

Домножая (5.8) на  $r^2 / RY$ , можно выделить части, зависящие только от радиуса и от угловых координат:

$$-\frac{\Delta_{\theta,\varphi} Y}{Y} = r^2 \left( \frac{\Delta_r R}{R} + k^2 \right) \equiv \lambda \quad (5.9)$$

Вводя постоянную разделения переменных  $\lambda$ , которая, вообще говоря, неизвестна и должна быть определена при последующем решении задачи, получим два независимых уравнения для радиальной и угловой компонент волновой функции:

$$\Delta_{\theta,\varphi} Y + \lambda Y = 0, \quad (5.10)$$

$$\Delta_r R + \left( k^2 - \frac{\lambda}{r^2} \right) R = 0. \quad (5.11)$$

Первое из полученных уравнений не зависит от  $r$ , и имеет такой вид для всех центральных потенциалов и сферически-симметричных задач. Оно также допускает разделение переменных:

$$Y(\theta, \varphi) = \Theta(\theta)\Phi(\varphi). \quad (5.11)$$

Поставляя (5.11) в (5.10) и разделяя переменные, получим:

$$\left( \Delta_\theta + \frac{1}{\sin^2 \theta} \Delta_\varphi \right) \Theta \Phi + \lambda \Theta \Phi = 0, \quad (5.12)$$

$$-\frac{\Delta_\varphi \Phi}{\Phi} = \sin^2 \theta \left( \frac{\Delta_\theta \Theta}{\Theta} + \lambda \right) \equiv m^2, \quad (5.13)$$

где введена еще одна константа разделения переменных  $m$ . Из (5.13) получаются два независимых уравнения:

$$\Delta_\varphi \Phi + m^2 \Phi = 0, \quad (5.14)$$

$$\Delta_\theta \Theta + \left( \lambda - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right) \Theta = 0. \quad (5.15)$$

Уравнение (5.14),  $\Phi'' + m^2 \Phi = 0$  имеет решение

$$\Phi = C e^{im\varphi}. \quad (5.16)$$

Из периодичности волновой функции

$$\Phi(\varphi + 2\pi) = \Phi(\varphi),$$

следует  $e^{i2\pi m} = 1$ , т.е. константа  $m$  может принимать только целые значения:  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

Нормируя  $\Phi_m(\varphi) = C e^{im\varphi}$  условием  $\int_0^{2\pi} |\Phi(\varphi)|^2 d\varphi = 1$ , получаем

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (5.17)$$

Теперь рассмотрим уравнение (5.15). Его можно записать как

$$\frac{d^2\Theta}{d\theta^2} + \operatorname{ctg}\theta \frac{d\Theta}{d\theta} + \left( \lambda - \frac{m^2}{\sin^2\theta} \right) \Theta = 0.$$

Сделаем замену  $x = \cos\theta$  ( $-1 \leq x \leq 1$ ) и найдем производные:

$$\begin{aligned} \frac{d\Theta}{d\theta} &= \frac{dx}{d\theta} \frac{d\Theta}{dx} = -\sin\theta \frac{d\Theta}{dx}, \\ \frac{d^2\Theta}{d\theta^2} &= -\frac{d}{d\theta} \left( \sin\theta \frac{d\Theta}{dx} \right) = -\cos\theta \frac{d\Theta}{dx} - \sin\theta \frac{d}{d\theta} \frac{d\Theta}{dx} = \\ &= -\cos\theta \frac{d\Theta}{dx} + \sin^2\theta \frac{d^2\Theta}{dx^2} = -x \frac{d\Theta}{dx} + (1-x^2) \frac{d^2\Theta}{dx^2}. \end{aligned}$$

Их подстановка в (5.15) даёт:

$$\frac{d}{dx} \left( (1-x^2) \frac{d\Theta}{dx} \right) + \left( \lambda - \frac{m^2}{1-x^2} \right) \Theta = 0. \quad (5.18)$$

Уравнение (5.18) называется *уравнением Лежандра*. Из его свойств следует, что константа  $\lambda$  может быть выражена через неотрицательное целое число  $l$  следующим образом:

$$\lambda = l(l+1), \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad (5.19)$$

Функция  $\Theta(\cos\theta)$  с точностью до нормировочного коэффициента совпадает с *присоединёнными полиномами Лежандра*  $P_l^m(x)$ . Решение уравнения (5.18) при  $m = 0$  описывается *полиномами Лежандра* и может быть получено в виде ограниченных степенных рядов, аналогично построению полиномов Эрмита при рассмотрении задачи о квантовом гармоническом осциляторе (см. п. 4.1). Альтернативным способом их вычисления явля-

ется использование производящей функции (для полиномов Лежандра она известна под названием формулы Родрига):

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2 - 1)^l. \quad (5.20)$$

Для них справедливы также рекуррентные формулы:

$$\begin{aligned} P_{l+1}(x) &= \frac{2l+1}{l+1} x P_l(x) - \frac{l}{l+1} P_{l-1}(x), \\ P_{l+1}(x) &= x P_l(x) + \frac{x^2 - 1}{l+1} \frac{d P_l(x)}{dx}. \end{aligned} \quad (5.21)$$

Приведём несколько первых полиномов Лежандра:

$$\begin{aligned} P_0(x) &= 1, \quad P_1(x) = x, \\ P_2(x) &= \frac{1}{2}(3x^2 - 1), \quad P_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x). \end{aligned}$$

Присоединённые полиномы Лежандра при  $m \neq 0$  могут быть получены дифференцированием полиномов Лежандра:

$$P_l^m(x) = (1-x^2)^{|m|/2} \frac{d^{|m|}}{dx^{|m|}} P_l(x), \quad (5.22)$$

или с помощью обобщенной формулы Родрига:

$$P_l^m(x) = \frac{(1-x^2)^{|m|/2}}{2^l l!} \frac{d^{l+|m|}}{dx^{l+|m|}} (x^2 - 1)^l. \quad (5.23)$$

Отметим, что эти функции четны по  $m$ :  $P_l^m(x) = P_l^{|m|}(x)$ .

Приведём несколько присоединённых функций Лежандра младших порядков:

$$\begin{aligned}
P_l^0(x) &= P_l(x), \quad P_1^1(x) = \sqrt{1-x^2}, \\
P_2^1(x) &= 3x\sqrt{1-x^2}, \quad P_2^2(x) = 3(1-x^2), \\
P_3^1(x) &= \frac{3}{2}(5x^2-1)\sqrt{1-x^2}, \quad P_3^2(x) = 15x(1-x^2), \\
P_3^3(x) &= 15(1-x^2)^{3/2}.
\end{aligned}$$

Более подробное описание свойств функций  $P_l^m(x)$  можно найти в литературе по математической физике.

Функции  $\Theta_l^m(x)$  и  $P_l^m(x)$  отличаются лишь коэффициентом:

$$\Theta_l^m(x) = \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^m(x). \quad (5.24)$$

Физически числа  $l$  и  $m$  связаны с орбитальным угловым моментом частицы, движущейся в сферически-симметричном поле.  $l$  – орбитальное квантовое число (позже мы увидим, что возможные значения  $l$  ограничены,  $0 \leq l \leq n-1$ , где  $n$  – главное квантовое число). Магнитное квантовое число  $m$  определяет проекцию орбитального момента на выбранную ось и может принимать  $2l+1$  целочисленных значений от  $-l$  до  $l$ . Подробнее физический смысл этих квантовых чисел будет обсуждаться в следующей части учебного пособия.

Таким образом, функция  $Y$  имеет вид

$$\begin{aligned}
Y_l^m(\theta, \varphi) &= N_{lm} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}, \\
l &= 0, 1, 2, \dots, \quad m = -l, -l+1, \dots, 0, 1, \dots, l,
\end{aligned} \quad (5.25)$$

Нормировочный коэффициент определяется из условия

$$\int |\psi(r, \theta, \varphi)|^2 dV = 1.$$

Принято отдельно нормировать угловую часть:

$$\int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\varphi Y_{l'm'}^*(\theta, \varphi) Y_{lm}(\theta, \varphi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'},$$

$$\int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\varphi |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 = 1.$$

и отдельно радиальную:

$$\int_0^\infty |R(r)|^2 r^2 dr = 1.$$

Нормировка угловой части даёт

$$N_{lm} = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}.$$

Функции  $Y_l^m(\theta, \varphi)$  называются *сферическими гармониками*. Они образуют ортонормированную систему функций и могут быть использованы для разложения любой функции (волновой функции системы), зависящей от переменных  $\theta$  и  $\varphi$ , в ряд, подобный ряду Фурье:

$$f(\theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{m=+l} a_{lm} Y_l^m(\theta, \varphi).$$

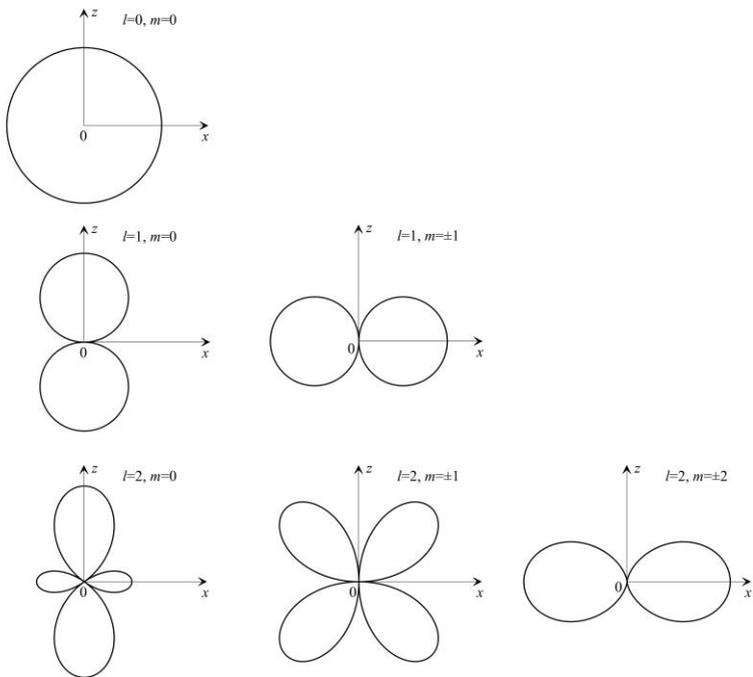
Величины  $|a_{lm}|^2$  определяют вероятность системе находится в состоянии с квантовыми числами  $l, m$ .

Приведем несколько функций наименьших порядков:

$$Y_0^0 = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}, \quad Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta,$$

$$Y_1^1 = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\varphi}, \quad Y_1^{-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{-i\varphi}.$$

Функция  $|Y_l^m(\theta, \varphi)|$  описывает поверхность вращения во-круг оси  $z$ . Полярные графики  $|Y_l^m(\theta, \varphi)|$  в плоскости, содержащей ось  $z$ , для  $l=0,1,2$  и всех возможных значений  $m$  приведены на рис. 33. Они дают представление о вероятности найти электрон в атоме под определенным углом  $\theta$  в состоянии с квантовыми числами  $l, m$ .



**Рис. 33.** Структура сферических функций в зависимости от полярного угла для  $l = 0, 1, 2$

Перейдем к радиальной части волновой функции, которая определяется уравнением:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E - U(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R = 0, \quad (5.26)$$

где

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) = \frac{\partial^2 R}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial R}{\partial r}.$$

Решение уравнения (5.26) для конкретного вида потенциала  $U(r)$  даёт энергетический спектр задачи.

В следующих двух параграфах мы будем рассматривать состояния с  $l = 0$  (т.е. и  $m = 0$ ). Такие состояния обладают полной сферической симметрией, поскольку  $Y_0^0(\theta, \varphi) = \text{const}$ , и вся

волновая функция сводится к  $R(r)$ . Соответственно, задача о поведении частицы в сферическом потенциале по своей структуре приближаются к изученным ранее одномерным задачам. Также мы ограничимся описанием задач, движение в которых финитно. Задачи рассеяния, в которых реализуется инфинитное движение и непрерывный спектр энергии, лежат за рамками настоящего пособия.

## 5.2. Сферическая потенциальная яма

Как и ранее, простейшей из возможных задач является сферически-симметричная прямоугольная потенциальная яма.

Рассмотрим сначала случай бесконечно глубокой ямы:

$$U(r) = \begin{cases} 0, & r \leq a, \\ \infty, & r > a. \end{cases} \quad (5.27)$$

При  $r > a$  выполняется условие  $\psi(a) = 0$ , поскольку частица не может проникнуть за пределы ямы (см. п. 3.2). Внутри ямы уравнение Шрёдингера (5.26) при  $l = 0$  имеет вид:

$$\frac{\partial^2 R}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial R}{\partial r} + k^2 R = 0, \quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E. \quad (5.28)$$

В центре потенциальной ямы необходимо потребовать, чтобы плотность вероятности оставалась конечной во избежание получения результатов, противоречащих вероятностной интерпретации волновой функции. Это можно выразить пределом

$$\lim_{r \rightarrow 0} rR(r) = 0. \quad (5.29)$$

Сделаем подстановку в уравнении (5.28):

$$R(r) = \chi(r)/r, \quad (5.30)$$

где  $\chi$  – новая неизвестная функция. После всех преобразований и приведения подобных слагаемых, для неё получается следующее уравнение:

$$\chi'' + k^2 \chi = 0, \quad (5.31)$$

при этом, согласно (5.29), в центре ямы должно быть выполнено условие  $\chi(0) = 0$ . Решение такой краевой задачи следующее:

$$\chi(r) = C \sin kr. \quad (5.32)$$

Условие на внешней границе потенциальной ямы определяет возможные значения  $k$ , и, следовательно, энергетические уровни частицы  $E_n$ :

$$k = \frac{\pi n}{a}, \quad E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2}. \quad (5.33)$$

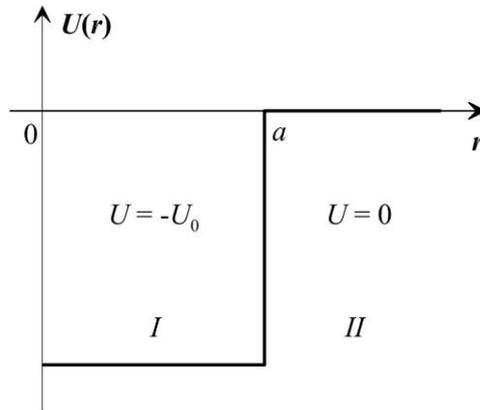
Наконец, постоянная  $C$  определяется условием нормировки волновой функции  $R(r)$ :

$$R(r) = C \frac{\sin kr}{r}, \quad \int_0^a |R(r)|^2 r^2 dr = 1,$$

что даёт  $C = 1 / (2\pi a)^{1/2}$ .

Перейдём теперь к яме конечной глубины. Эта задача, в частности, является простой моделью для расчёта энергии связи атомных ядер. Потенциал определяется формулой (рис. 34):

$$U(r) = \begin{cases} -U_0, & r \leq a, \\ 0, & r > a. \end{cases} \quad (5.34)$$



**Рис. 34.** Структура потенциала для сферически-симметричной ямы конечной глубины

Волновая функция не равна нулю и снаружи потенциальной ямы (см. п. 3.3). Подстановка (5.30) приводит к паре уравнений для областей внутри и вне ямы, решения которых связаны условиями непрерывности волновой функции и её производной на границе:

$$\begin{aligned} \chi_1'' + k^2 \chi_1 &= 0, & k^2 &= \frac{2m}{\hbar^2}(E + U_0), & r &\leq a, \\ \chi_2'' - \kappa^2 \chi_2 &= 0, & \kappa^2 &= -\frac{2m}{\hbar^2}E, & r &> a. \end{aligned} \quad (5.35)$$

Решение во внутренней области имеет вид (5.32), а во внешней области экспоненциально затухает:

$$\chi_2(r) = C_2 e^{-\kappa r}.$$

Равенство логарифмических производных волновых функций на границе ямы даёт уравнение, связывающее  $k$  и  $\kappa$ , решение которого определит энергетический спектр частицы в потенциальной яме:

$$\kappa = -k \operatorname{ctg} ka. \quad (5.36)$$

Из определения  $k$  и  $\kappa$  (см. (5.30)) следует также соотношение

$$k^2 + \kappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2} U_0. \quad (5.37)$$

Систему (5.36)–(5.37) удобно решать графически на плоскости  $x = ka$ ,  $y = \kappa a$  (рис. 35). Уравнение (5.37) определяет на ней график окружности, точка пересечения которой с кривой (5.36) однозначно определяет энергию частицы  $E$ .

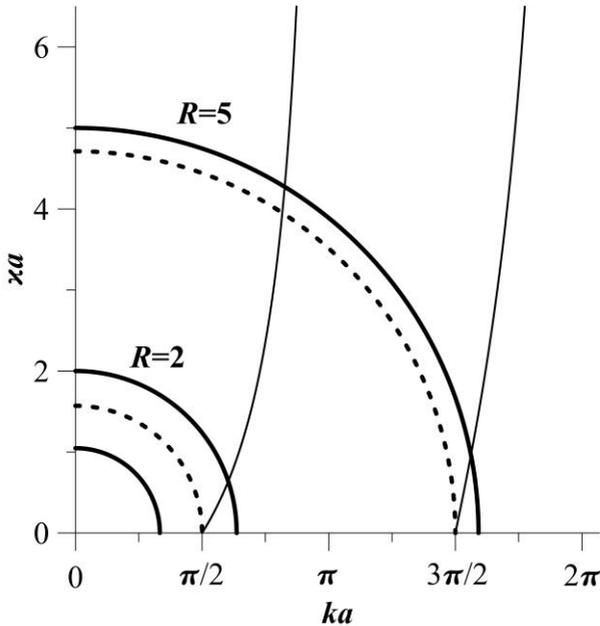


Рис. 35. Графическое решение задачи об уровнях энергии частицы в сферически-симметричной потенциальной яме конечной глубины

Варьируя значения глубины и ширины потенциальной ямы, определяющие радиус окружности на рис. 35, можно увидеть, что при их достаточно малых значениях система не имеет решения – в такой яме не существует связанных состояний и стабильных энергетических уровней. Пунктирные окружности соответствуют появлению одного связанного состояния с энергией  $E = 0$ . Дальнейший рост глубины и ширины потенциальной ямы приводят к смещению первого энергетического уровня от нулевого значения и появлению новых уровней.

Применим описанную задачу к определению характеристик ядра дейтерия – тяжёлого изотопа водорода, ядро которого содержит протон и нейтрон. В первом приближении ядро можно считать сферически симметричным и поэтому волновая функция ядра также должна быть сферически симметричной. Из решения системы (5.36)–(5.37) находим, что при радиусе ямы в  $2 \cdot 10^{-15}$  м (характерный радиус действия ядерных сил) и энергии

протона в такой яме, равной  $-2.22$  МэВ (экспериментально измеренная энергия связи ядра дейтерия), её глубина должна составлять не менее  $35$  МэВ. При таком радиусе ямы такое значение  $U_0$  будет отвечать первой пунктирной окружности радиусом  $\pi/2$  на рис. 35.

### 5.3. Уровни энергии водородоподобного атома

Наконец, рассмотрим движение электрона в кулоновском потенциале, создаваемом положительно заряженным ядром атома. Будем считать, что вокруг ядра обращается только один электрон, как у атома водорода, однократно ионизированного атома гелия, и т.д.:

$$U(r) = -\frac{Ze^2}{r}. \quad (5.38)$$

Будем решать уравнение (5.26) для  $l = 0$ :

$$\frac{\partial^2 R}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial R}{\partial r} + k^2(r)R = 0, \quad k^2(r) = \frac{2m}{\hbar^2} \left( E + \frac{Ze^2}{r} \right). \quad (5.39)$$

Замена переменной (5.30)  $R(r) = \chi(r)/r$  даёт уравнение для  $\chi$ :

$$\chi'' + \frac{\beta}{r} \chi - k_0^2 \chi = 0, \quad (5.40)$$

где введены обозначения

$$\beta = \frac{2mZe^2}{\hbar^2} = \frac{2Z}{a_0}, \quad k_0^2 = -\frac{2m}{\hbar^2} E, \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2},$$

$a_0 \approx 0.53 \text{ \AA}$  – боровский радиус.

Краевые условия для уравнения (5.40) следуют из того, что электрон не может упасть на ядро и не может “вылететь” из атома:

$$\chi(0) = 0, \quad \chi(\infty) \rightarrow 0.$$

Точное решение уравнения (5.40) можно построить способом, аналогичным решению задачи для гармонического осциллятора (см. п. 5.1).

Сначала рассмотрим асимптотику уравнения (5.40) при больших  $r$ . Вторым слагаемым при этом можно пренебречь, и уравнение превращается в линейное с постоянными коэффициентами:

$$\chi'' - k_0^2 \chi = 0,$$

откуда следует, что на бесконечности решение экспоненциально затухает:  $\chi(r) \propto e^{-k_0 r}$ . Соответственно, полное решение задачи можно искать в виде  $\chi(r) = f(r)e^{-k_0 r}$ , где  $f(r)$  – ограниченная функция. Подстановка в (5.40) приводит к уравнению

$$f'' - 2k_0 f' + \frac{\beta}{r} f = 0, \quad (5.41)$$

решение которого, в свою очередь, будем искать в виде степенного ряда:

$$f = \sum_{n=1}^{\infty} a_n r^n. \quad (5.42)$$

Ряд начинается с  $n = 1$ , чтобы в уравнении (5.41) исключить сингулярность при  $r = 0$ . Тогда:

$$f'(r) = \sum_{n=1} n a_n r^{n-1},$$

$$f''(r) = \sum_{n=1} n(n-1) a_n r^{n-2} = \sum_{n=1} n(n+1) a_{n+1} r^{n-1}.$$

Подстановка производных в уравнение (5.41) даёт:

$$\sum_{n=1}^{\infty} [n(n+1) a_{n+1} - 2k_0 n a_n + \beta a_n] r^{n-1} = 0,$$

откуда следует рекуррентное соотношение для коэффициентов разложения:

$$a_{n+1} = \frac{2k_0 n - \beta}{n(n+1)} a_n . \quad (5.43)$$

Ряд с такими коэффициентами сходится к функции  $e^{2k_0 r}$  – это легко проверить, разложив эту экспоненту в ряд. Этот результат нас не может устроить, т.к. при этом  $\chi(r) = f(r)e^{-k_0 r}$  расходится при  $r \rightarrow \infty$ . Поэтому надо оборвать ряд (5.42), превратив его в полином. Требуя, чтобы коэффициенты  $a_n$  были равны 0, начиная с некоторого значения  $n_{\max}$ , которое будем обозначать просто как  $n$ , приходим к условию:

$$2k_0 n - \beta = 0,$$

которое в итоге определяет энергетический спектр частицы в кулоновском потенциале:

$$E_n = -\frac{me^4 Z^2}{2\hbar^2 n^2}. \quad (5.44)$$

Фундаментальные постоянные можно объединить в одну величину, называемую *постоянной Ридберга*:

$$E_n = -\frac{Z^2 R_1}{n^2}, \quad R_1 = \frac{me^4}{2\hbar^2} \approx 13.6 \text{ эВ}. \quad (5.45)$$

Это выражение можно также записать в виде

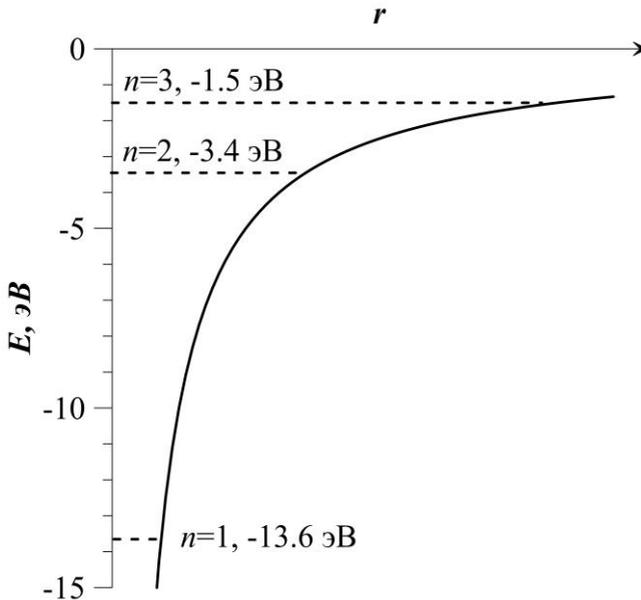
$$E_n = -\frac{Z^2 e^2}{2n^2 a_0}. \quad (5.46)$$

Таким образом, реализуется квадратичная зависимость уровней энергии от числа  $n$ , называемого *главным квантовым числом* (рис. 36). Его минимальное значение равно 1 и отвечает наименьшей возможной энергии электрона – основному (или невозбуждённому) состоянию атома (для водорода  $Z = 1$  энергия  $E_1 \approx -13.6$  эВ). Электрон находится в *стационарном состоянии*  $E_n$  до тех пор пока под действием на него какого-либо внешнего воздействия он перейдет в другое стационарное состояние (на

другой уровень). При этом произойдет излучение или поглощение энергии:

$$E_m - E_n = \hbar\omega, \quad (5.47)$$

где  $\omega$  – частота излучаемого (поглощаемого, в случае возбуждения) фотона. В случае, когда энергия поглощаемого фотона равна или превышает энергию основного состояния, электрон отрывается от атома – происходит *ионизация*. Поэтому постоянная  $R_1$  часто называется *потенциалом ионизации*.



**Рис. 36.** Энергетические уровни атома водорода (сместить направо  $n=2, n=3$ )

Как мы увидим дальше, значения  $E_n$  для водородоподобного атома не зависят от значения  $l$ , т.е. формула (5.45) выполняется для всех  $l$ .

Постоянная Ридберга может быть выражена через фундаментальную *постоянную тонкой структуры*:

$$R_1 = \frac{mc^2}{2} \alpha^2, \quad \alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137.036}. \quad (5.48)$$

Константа  $\alpha$  является универсальной безразмерной физической величиной, характеризующей интенсивность электромагнитного взаимодействия. Она впервые была введена Арнольдом Зоммерфельдом при описании тонкой структуры спектральных линий атома водорода – дополнительного расщепления линий спектра, вызванного спин-орбитальным взаимодействием и релятивистскими эффектами.

Уравнение (5.45) определяет энергетический спектр и характерные *спектральные серии* атома водорода и водородоподобных ионов. Длину волны, отвечающую переходам между энергетическими уровнями  $n$  и  $m$ , можно найти из соотношения (5.47) переписав его так:

$$\frac{1}{\lambda_{nm}} = \frac{E_m - E_n}{2\pi c \hbar}.$$

Отсюда следует *формула Ридберга*:

$$\frac{1}{\lambda_{nm}} = \frac{Z^2 R_1}{2\pi c \hbar} \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) = Z^2 R_\infty \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right), \quad (5.49)$$

где введена ещё одна величина, также называемая постоянной Ридберга:

$$R_\infty = \frac{R_1}{2\pi c \hbar} = \frac{\alpha^2}{4\pi \lambda_C}, \quad (5.50)$$

$$R_\infty \approx 109737.3 \text{ см}^{-1}.$$

Более точные значения длин волн в спектральных сериях атома водорода можно получить, заменив массу электрона (она входит в комптоновскую длину в (5.49)) приведённой массой:

$$\mu = \frac{m m_p}{m + m_p}, \quad (5.51)$$

где  $m_p$  – масса протона. С этой поправкой постоянная Ридберга  $R_M \approx 109677.3 \text{ см}^{-1}$ , что с этой точностью совпадает с экспериментальным значением.

Зафиксировав в формуле (5.49) значение  $n_1$  (основной энергетической уровень серии) и перебирая все значения  $n_2 > n_1$ , можно построить линейчатые спектры атома водорода и других водородоподобных ионов. На рис. 37 изображены границы спектральных серий Лаймана, Бальмера, Пашена и Брэккета (переходы с  $n \rightarrow \infty$  на  $n = 1, 2, 3$  и  $4$ , соответственно).

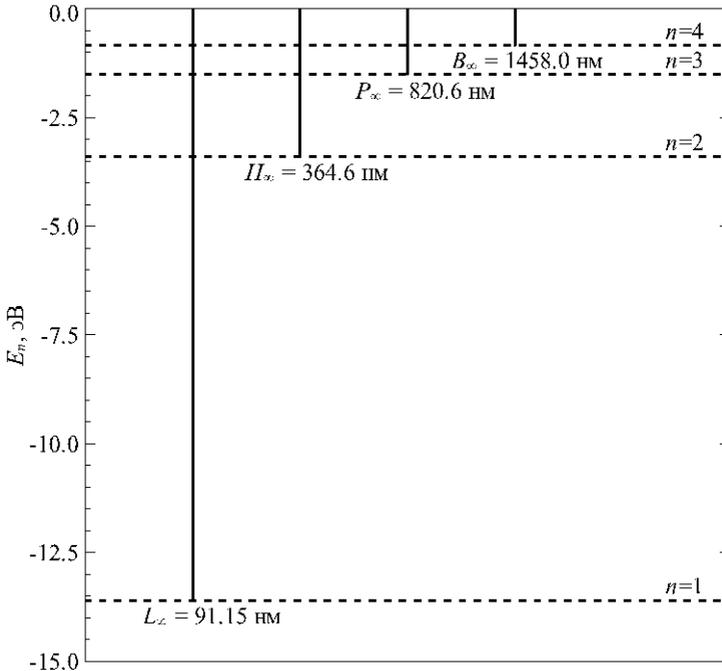


Рис. 37. Границы спектральных серий атома водорода

#### 5.4. Радиальная волновая функция водородоподобного атома

В заключение найдем волновую функцию  $\psi$  при  $l = 0$  и обсудим ее физический смысл. Поскольку сферическая гармо-

ника  $Y_0^0 = const$ , то  $\psi(r, \theta, \varphi)$  сводится к радиальной волновой функции:

$$R_n(r) = \frac{1}{r} e^{-k_0 r} f(r),$$

$$f(r) = \sum_{n=1}^n a_n r^n.$$
(5.52)

Получим её явный вид для нескольких первых энергетических уровней.

Для основного состояния атома  $n = 1$ :

$$R_1(r) = \frac{1}{r} e^{-k_0 r} a_1 r = a_1 e^{-k_0 r}.$$
(5.53)

Значение коэффициента  $a_1$  находится из условия нормировки:

$$\int_0^{\infty} dr r^2 a_1^2 e^{-2k_0 r} = -\frac{a_1^2}{4k_0^3} e^{-2k_0 r} (2k_0^2 r^2 + 2k_0 r + 1) \Big|_0^{\infty} = \frac{a_1^2}{4k_0^3} = 1,$$

$$a_1 = 2k_0^{3/2},$$

Поскольку  $k_0 = \beta / (2n) = Z / (a_0 n)$ , окончательный вид первой радиальной волновой функции такой:

$$R_1(r) = 2 \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}.$$
(5.54)

Рассмотрим состояние  $n = 2$ :

$$R_2(r) = \frac{1}{r} e^{-k_0 r} (a_1 r + a_2 r^2) = e^{-k_0 r} (a_1 + a_2 r).$$

Выразим коэффициент  $a_2$  через  $a_1$ , используя формулу (5.43):

$$\beta = 2k_0 n = 4k_0,$$

$$a_2 = a_1 \frac{2k_0 - 4k_0}{2} = -k_0 a_1.$$

Тогда

$$R_2(r) = a_1 e^{-k_0 r} (1 - k_0 r).$$

Нормировка волновой функции  $\int_0^{\infty} |R(r)|^2 r^2 dr = 1$  дает:

$$\begin{aligned} & \int_0^{\infty} dr r^2 a_1^2 (1 - k_0 r)^2 e^{-2k_0 r} = \\ & = -\frac{a_1^2}{4k_0^3} e^{-2k_0 r} (2k_0^4 r^4 + 2k_0^2 r^2 + 2k_0 r + 1) \Big|_0^{\infty} = \frac{a_1^2}{4k_0^3} = 1, \\ & a_1 = 2k_0^{3/2}. \end{aligned}$$

Окончательно

$$R_1(r) = 2 \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-\frac{Zr}{2a_0}} \left( 1 - \frac{Zr}{2a_0} \right). \quad (5.55)$$

Вероятность того, что электрон в водородоподобном атоме находится в шаровом слое  $r_1 \leq r \leq r_2$  определяется соотношением

$$w(r_1 \leq r \leq r_2) = \int_{r_2}^{r_1} R_n^2 r^2 dr = \int_{r_2}^{r_1} p_n dr,$$

где  $p_n = r^2 R_n^2$  – плотность распределения вероятности в радиальном направлении. Ясно, что  $p_n(r=0) = 0$ .

Для основного состояния:

$$p_1(r) = 4 \left( \frac{Z}{a_0} \right)^3 r^2 e^{-2Zr/a_0}. \quad (5.56)$$

Максимум этой функции находится из равенства нулю ее производной. Найдя ее, получаем, что в атоме водорода ( $Z = 1$ ) электрон с наибольшей вероятностью находится от ядра на расстоянии, равном боровскому радиусу:

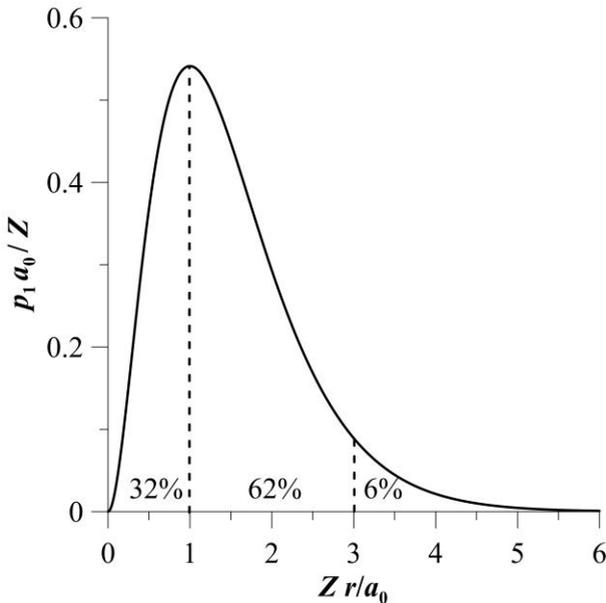
$$a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} \approx \frac{1.06 \cdot 10^{-27}}{9.1 \cdot 10^{-28} \cdot (4.8 \cdot 10^{-10})^2} \approx 0.53 \text{ \AA}.$$

В качестве примера оценим вероятность обнаружения электрона, находящегося в основном состоянии, в следующих шаровых слоях:

$$w(0 \leq r \leq a_0) = 1 - 5e^{-2} \approx 0.32,$$

$$w(3a_0 \leq r < \infty) = 25e^{-6} \approx 0.06.$$

На рис 38 приведен график плотности вероятности для состояния  $n = 1$ .



**Рис. 38.** Радиальное распределение плотности вероятности для состояния с  $n = 1$  и вероятности обнаружить частицу в выделенных интервалах

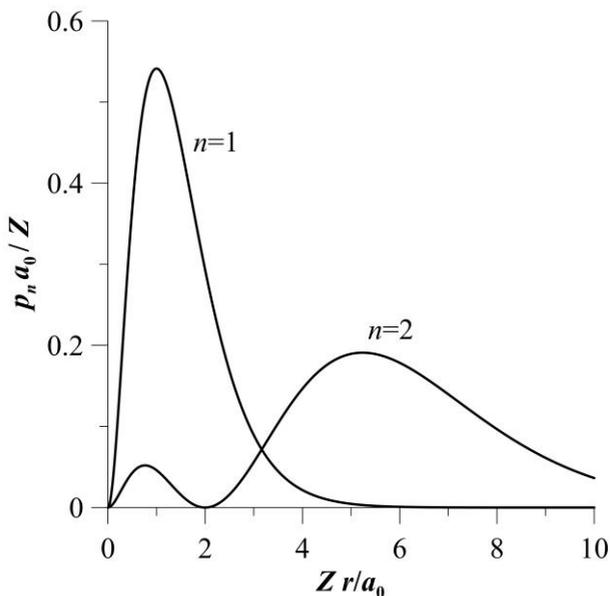
Для состояния с  $n = 2$ :

$$p_2(r) = \frac{1}{2} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^3 r^2 \left( 1 - \frac{Zr}{2a_0} \right)^2 e^{-Zr/a_0}. \quad (5.57)$$

Эта функция равна нулю в точках  $r = 0$  и  $r = 2a_0 / Z$ . В качестве упражнения найдите положения максимумов и их высоты.

Функция  $p_2(r)$  показана на рис. 39 в сравнении с плотностью вероятности основного состояния.

Ясно, что в атоме не существует классических «орбит» по которым движется электрон – для квантовой частицы можно говорить только о вероятности ее локализации в пространстве. Не существует физического способа определить где электрон находится в атоме «на самом деле» – любое детектирование, например, с помощью электромагнитного облучения с длиной волны порядка атомного размера, приведет к разрушению атома, поскольку энергия соответствующего фотона будет выше энергии ионизации атома.



**Рис. 39. Сравнение радиальных распределений плотности вероятности для состояний с  $n = 1$  и  $n = 2$**

## 6. ЗАДАЧИ И УПРАЖНЕНИЯ

В этом разделе собраны простые задачи и дополнительные задания ко всем разделам пособия, которые могут расширить представления о рассмотренных выше квантово-механических системах.

1. При облучении свинцовой пластинки ультрафиолетовым излучением с длинами волн 200 и 250 нм, максимальная кинетическая энергия электронов равна 2.162 и 0.919 эВ, соответственно. Рассчитайте постоянную Планка и работу выхода для свинца.
2. Цезиевая пластинка освещается ультрафиолетовым излучением с длиной волны 300 нм. Фототок полностью прекращается при подаче задерживающего напряжения 2.34 В. Вычислите:
  - работу выхода для цезия;
  - красную границу фотоэффекта;
  - максимальную энергию фотоэлектронов.
3. Покажите, что энергия высокоэнергетических фотонов ( $E \gg m_e c^2$ ) в эксперименте Комптона, рассеянных на угол  $\pi$ , приближенно равна половине энергии покоя электрона и практически не зависит от их начальной энергии.
4. Фотон рассеивается на покоящемся электроне на угол  $60^\circ$ , при этом изменение длины волны – в два раза больше длины волны первоначального фотона. Рассчитайте:
  - исходную длину волны;
  - кинетическую энергию электрона отдачи.
5. Энергия гамма-квантов равна 15 МэВ. Найти энергию электронов отдачи в эксперименте Комптона, если фотон рассеивается на угол  $\pi$ .
6. При рассеянии фотона на покоящемся электроне на угол  $\pi/3$ , кинетическая энергия электрона отдачи равна 600 эВ. Найдите энергию падающего фотона.
7. Электрон заключён в области с размерами порядка 0.1 нм. Оцените неопределённость импульса электрона.

8. Оцените неопределённость скорости электрона в атоме водорода, считая, что его диаметр порядка  $1 \text{ \AA}$ . Сравните найденную оценки со значением скорости электрона, полученным в боровской модели атома для первой орбиты.
9. Покажите, что длина волны де Бройля целое число раз укладывается на любой боровской орбите электрона.
10. Электронный микроскоп обладает пространственным разрешением  $0.15 \text{ нм}$ . Оцените энергию электронов в его луче.
11. При делении урана в ядерном реакторе испускаются нейтроны с энергией  $2 \text{ МэВ}$ . Сталкиваясь с окружающими атомами, они замедляются до средней энергии  $0.025 \text{ эВ}$ .
  - Определите длину волны де Бройля, соответствующую указанным значениям энергии нейтронов.
  - Для выделения потока нейтронов с низкой энергией в реакторе используются блоки поликристаллического графита. Дайте качественное объяснение, почему низкоэнергетические частицы свободно проходят через графит, а нейтроны с высокой энергией отражаются от его граней.
  - Какова наименьшая длина волны нейтронов, способных пройти через кристалл графита без отражений? Постоянная решётки графита  $a \approx 2 \text{ \AA}$ .

*Указание:* воспользоваться условием Вульфа–Брэгга (п. 1.3).
12. Найти расстояние между максимумами дифракционной картины от пучка электронов с энергией  $24 \text{ эВ}$ , проходящего через диафрагму с двумя щелями, расположенными на расстоянии  $d = 30 \text{ мкм}$ . Расстояние от экрана до диафрагмы  $50 \text{ см}$ .
13. В эксперименте по дифракции электронов на поликристаллическом образце при энергии электронов  $200 \text{ эВ}$ , радиус первого дифракционного кольца равен  $1.5 \text{ см}$  при расстоянии от экрана  $15 \text{ см}$ . Определите соответствующее ему межплоскостное расстояние.
14. Определить, квантовыми или классическими законами следует описывать перечисленные системы:
  - электрон в атоме; характерная энергия – постоянная Ридберга, характерный размер – боровский радиус;

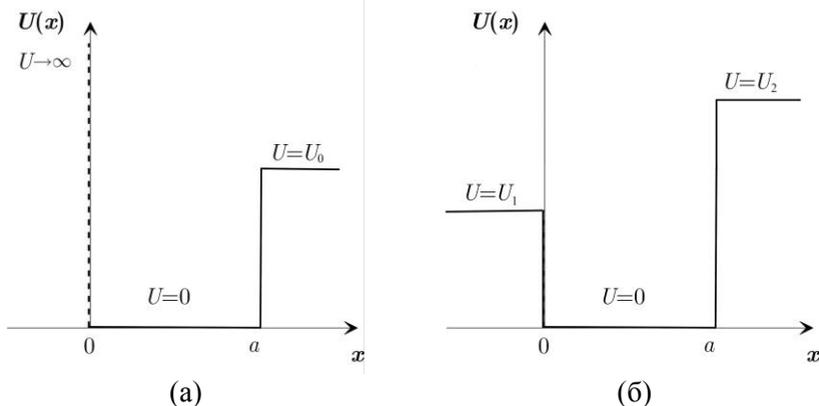
- протон в ядре; энергия движения протона  $\sim 10$  МэВ, размер ядра  $\sim 10^{-13}$  см;
  - электрон в вакуумной трубке с напряжением 10 кВ;
  - электронный газ плотностью  $10^{20}$  см $^{-3}$  при температуре 300 К.
15. Оцените длину волны де Бройля релятивистских частиц:
    - протона, движущегося со скоростью  $0.99c$ ;
    - электрона, скорость которого равна  $0.999c$ .
  16. Найдите значения кинетической энергии электрона и протона, при которых различие длины волны де Бройля, вычисленной по нерелятивистской и релятивистской формулам, не превышает 1%.
  17. Определите длину волны де Бройля электрона с кинетической энергией 13.6 эВ (потенциал ионизации водорода). Сравните её с боровским радиусом.
  18. Найдите длину волны де Бройля для  $\alpha$ -частицы с кинетической энергией 7.7 МэВ. Справедливо ли при анализе опыта Резерфорда не учитывать волновые свойства частиц, если типичные расстояния в нём –  $10^{-15}$  м.
  19. Для электрона в бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме шириной  $1 \text{ \AA}$  вычислите:
    - энергию трёх низших состояний и соответствующую им длину волны, изобразите плотности вероятности;
    - частоту излучения, способного перевести электрон из основного состояния на третий энергетический уровень;
    - какие длины волн будут излучаться при возвращении электрона в основное состояние.
  20. В одномерной бесконечно глубокой потенциальной яме шириной  $a$  находится частица, волновая функция которой даётся выражением

$$\psi(x) = A \sin^2 \frac{\pi x}{a}.$$

Найти вероятность пребывания частицы в основном состоянии, среднее значение кинетической энергии.

21. Найти приближённое выражение для энергии связи частицы массой  $m$  в одномерной прямоугольной яме глубины  $U_0$

и малой ширины  $a \ll \hbar / \sqrt{2mU_0}$ , пребывающей в основном состоянии. Вычислить вероятность обнаружения частицы внутри и снаружи ямы.



**Рис. 40. Несимметричные потенциальные ямы: а) – с одной бесконечной стенкой; б) – с конечными стенками**

22. Найти уровни энергии и собственные функции частицы в несимметричной прямоугольной потенциальной яме с одной бесконечно высокой стенкой (рис. 40, а):

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0, \\ 0, & x \in [0, a], \\ U_0, & x > a. \end{cases}$$

Сколько есть уровней в яме при  $U_0 = 32 \frac{\hbar^2}{ma^2}$ .

23. Найти уровни энергии и собственные функции частицы в несимметричной прямоугольной потенциальной яме со стенками различной конечной высоты (рис. 40, б):

$$U(x) = \begin{cases} U_1, & x < 0, \\ 0, & x \in [0, a], \\ U_2, & x > a, \end{cases} \quad U_1 < U_2$$

24. Оцените минимальную кинетическую энергию нейтрона в ядре, считая, что его потенциал аппроксимируется одномерной прямоугольной потенциальной ямой бесконечной

глубины и шириной  $10^{-4}$  Å. Оцените минимальную кинетическую энергию электрона в этой же яме. Может ли электрон находиться внутри ядра?

25. Вычислить энергетический спектр нейтрона в ядрах кислорода-16 и свинца-208, считая, что поле ядерных сил образует потенциальную яму с бесконечно высокими стенками радиусом  $a = r_0 A^{1/3}$ , где  $r_0 = 1.3 \cdot 10^{-13}$  см,  $A$  – массовое число.
26. При облучении разреженного криптона потоком электронов, их рассеяние ослабевает при энергии электронов 0.9 эВ. Найти глубину соответствующей атому криптона прямоугольной потенциальной ямы, считая, что её ширина равна 1 борвскому радиусу.
27. Рассмотреть прохождение частицы с энергией  $E > U_0$  над барьером на рис. 15 справа налево. Найти коэффициенты прохождения и отражения.
28. Сравните коэффициенты прохождения и отражения для прямоугольного барьера высотой 10 эВ и шириной 1 Å для электрона и протона.
29. Определить коэффициент прохождения для «двойной ступеньки» (рис. 41), если энергия частицы выше максимальной потенциальной энергии. Сопоставьте его с коэффициентами прохождения для отдельных ступенек, составляющих полный потенциал. Определите условие максимума коэффициента прохождения.

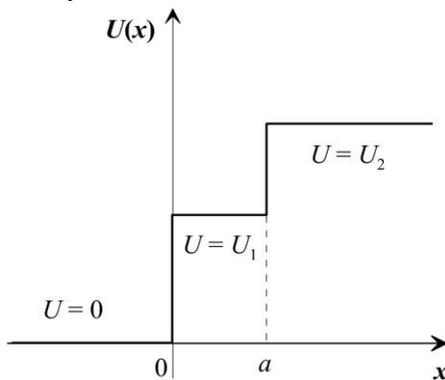
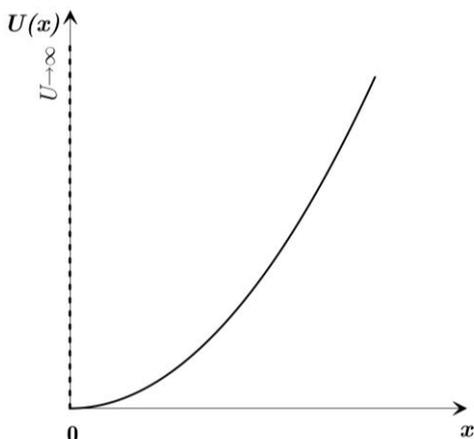


Рис. 41. Двойная потенциальная ступенька

30. Рассчитать энергетический спектр и собственные функции частицы в «полупараболическом» потенциале (рис. 42):

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0, \\ \frac{m\omega^2 x^2}{2}, & x > 0. \end{cases}$$

*Указание:* на левой границе волновая функция должна обращаться в нуль; соответственно, решениями удовлетворяющие этому условию функции «полного» осциллятора.



**Рис. 42. Несимметричный параболический потенциал**

31. Рассмотрите систему двух одинаковых гармонических осцилляторов. Найдите энергетические уровни, если:
- осцилляторы не взаимодействуют между собой;
  - взаимодействие осцилляторов описывается гамильтонианом  $H_{int} = k\hat{x}_1\hat{x}_2$ .
32. Частица помещена в поле гармонического осциллятора с собственной частотой  $\omega$ . Найти вероятность пребывания частицы в области пространства, запрещённой в классической механике, для состояний с  $n = 0, 1, 2, 3, 4$ .
- Указание:* Классические точки поворота  $x_n$  определяются равенством  $E_n = U(x_n)$ . Нужно вычислить вероятность пребывания частицы за пределами области  $[-x_n, x_n]$ .

33. Вычислить средние значения кинетической и потенциальной энергии гармонического осциллятора с собственной частотой  $\omega$ , соответствующие  $n$ -му состоянию.
34. Покажите, что для гармонического осциллятора с собственной частотой  $\omega$ , пребывающего в суперпозиции двух состояний:

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_0(x,t) + \Psi_1(x,t)),$$

выполняется

$$\langle x \rangle = C \cos \omega t.$$

*Указание:* нестационарная волновая функция определяется формулой (2.7):  $\Psi_n(x,t) = \psi_n(x) \exp(-iE_n t / \hbar)$ .

35. Найдите  $\langle x \rangle$  для гармонического осциллятора собственной частотой  $\omega$  в состоянии

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_0(x,t) + \Psi_3(x,t)).$$

36. Определите минимальную среднюю кинетическую энергию  $\langle T \rangle$  гармонического осциллятора с собственной частотой  $\omega$ .
37. Вычислить для основного состояния частицы в сферически симметричной прямоугольной потенциальной яме с нулевым моментом импульса наиболее вероятное значение её расстояния от центра ямы.
38. Найти приближённое выражение для энергии связи частицы массой  $m$  в сферически симметричной прямоугольной яме глубины  $U_0$  и радиуса  $a$ , пребывающей в основном состоянии, если выполняется:  $U_0 a^2 \approx \pi^2 \hbar^2 / 8m$ . Вычислить вероятность найти частицу внутри и снаружи ямы.
39. Для частицы в сферически симметричной потенциальной яме радиусом  $a$  с бесконечно высокими стенками, пребывающей в основном состоянии, найти:
- наиболее вероятное значение расстояния от центра ямы  $r_0$ ;
  - среднеквадратичное расстояние от центра ямы;
  - вероятность пребывания частицы в области  $r < r_0$ ;

- изобразить приблизительный вид графика  $|\psi(x)|^2$ .
40. Найдите максимальную и минимальную длину волны в спектральных сериях Лаймана и Пашена.
41. Пользуясь принципом неопределённости, оцените энергию основного состояния атома водорода и соответствующий ему радиус.  
*Указание:* поскольку в основном состоянии волновая функция является сферически симметричной, то импульс электрона и радиус «орбиты» связаны соотношением  $rp \sim \hbar$ ; кинетическая энергия электрона связана с импульсом:  $T = p^2 / 2m_e$ , а наиболее вероятное положение электрона в пространстве отвечает минимуму его полной энергии  $E(r) = T - U(r)$ .
42. Для водородоподобного иона  $\text{Li}^{2+}$  рассчитайте:  
 – энергию основного состояния;  
 – энергию и длину волны фотона, который переводит ион в третье возбуждённое состояние.
43. Для водородоподобного иона  $\text{C}^{5+}$  найдите и сравните со значениями для атома водорода:  
 – энергетические уровни;  
 – радиус орбит в рамках модели атома Бора;  
 – длину волны излучения, соответствующую переходу из состояния с  $n = 3$  в состояние с  $n = 1$ .
44. Для электрона в атоме водорода в основном состоянии найти среднее значение расстояния от ядра  $\langle r \rangle$ , а также  $\langle r^2 \rangle$  и среднее значение квадрата неопределённости положения электрона  $\langle (\Delta r)^2 \rangle$ .
45. Найти вероятность пребывания электрона с заданной энергией в атоме водорода за пределами классически доступной области (см. указание к задаче 23).
46. Вычислить для водорода и дейтерия разность энергии основного состояния и длины волн первых линий в серии Бальмера, обусловленные различием масс ядер.

47. Доказать, что среднее значение электрического дипольного момента атома водорода равно нулю в любом стационарном состоянии с заданным орбитальным моментом электрона.
48. *Позитронием* называется связанное состояние электрона и позитрона (античастицы электрона с такой же массой и противоположным электрическим зарядом). Это короткоживущая система, подобная по структуре атому водорода, где протон заменён позитроном. Рассчитайте:
- уровни энергии позитрония;
  - радиус стационарных орбит;
  - положение максимума первой радиальной волновой функции электрона;
  - длину волны излучения, которая приведёт к разрушению позитрония, пребывающего в состоянии с  $n = 1$ .
- Указание:* решение эквивалентно решению задачи об атоме водорода с приведённой массой электрона:

$$\mu = \frac{m_e^2}{m_e + m_e} = \frac{m_e}{2}.$$

49. Решите предыдущую задачу для мезоатома: водородоподобного атома, в котором вместо электрона вокруг ядра обращается мюон (масса мюона приблизительно равна  $207m_e$ ).
50. Фактор  $e^2 / a_0$  в формуле (5.46) для энергии атома можно интерпретировать как энергию поверхности радиусом  $a_0$  с зарядом  $e$ . Аналогично, представив электрон в виде заряженной поверхности, определим ее радиус так, чтобы энергия электрона равнялась его массе покоя:  $e^2 / a_e = mc^2$ . Сделать оценку для  $a_e$  – эта величина называется *классическим радиусом электрона*. Сравнить полученное значение  $a_e$  с боровским радиусом атома  $a_0$ . Заметим, что величина  $a_e$ , составленная из фундаментальных констант, определяет классическое сечение рассеяния в формуле Томсона.
51. Величина с размерностью длины, составленная из фундаментальных констант, включая ньютоновскую гравитаци-

онную постоянную  $G$ , называется планковской длиной  $l_p = \sqrt{\hbar G / c^3}$ . Сделайте оценку  $l_p$ .

52. В начальный момент времени волновая функция свободной частицы с импульсом  $p_0$  имеет вид

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i \frac{xp_0}{\hbar}}.$$

Найдите эволюцию волновой функции во времени.

53. Две жёстко связанные частицы, вращающиеся в плоскости, называются ротатором, и обладают моментом инерции  $J$ . Оператор энергии такой системы имеет вид

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2J} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}.$$

Опишите изменение волновой функции ротатора во времени, если начальное состояние задаётся функцией

$$\Psi(\varphi, 0) = A \sin^2 \varphi.$$

## СПИСОК РЕКОМЕНДУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Соколов А.А., Лоскутов Ю.М., Тернов И.М.* Квантовая механика (2-е изд.). М.: Просвещение, 1965. 638 с.
2. *Блохинцев Д.И.* Основы квантовой механики (5-е изд.). М.: Наука, 1976. 664 с.
3. *Давыдов А.С.* Квантовая механика: учеб. пособие. 3 изд. СПб.: БХВ-Петербург, 2011. 704 с.
4. *Шпольский Э.В.* Атомная физика. Том 1. Введение в атомную физику (6-е изд.). М.: Наука, 1974. 571 с.
5. *Шпольский Э.В.* Атомная физика. Том 2. Электронная оболочка атома и атомное ядро (4-е изд.). М.: Наука, 1974. 447 с.
6. *Фейнман Р., Лейтон Р., Сэндс М.* Фейнмановские лекции по физике. Т. 3. Излучение, волны, кванты. М.: Мир, 1965. 238 с
7. *Флюгге З.* Задачи по квантовой механике. Т. 1. М.: Мир, 1974. 341 с.
8. *Ферми Э.* Квантовая механика (конспект лекций). М.: Мир, 1965. 367 с.
9. *Мессиа А.* Квантовая механика: в 2 т. / Л.Д. Фадеев (ред.). М.: Наука, 1978 г.
10. *Бом Д.* Квантовая теория. М.: Наука, 1965. 728 с.
11. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теоретическая физика: учеб. пособие для вузов: в 10 т. Т. III: Квантовая механика (нерелятивистская теория) / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. М.: Физматлит, 2002. 808 с.
12. *Серова Ф.Г., Янкина А.А.* Сборник задач по теоретической физике: квантовая механика, статистическая физика. М.: Просвещение, 1979. 192 с.
13. *Галицкий В.М., Карнаков Б.М., Коган В.И.* Задачи по квантовой механике. 2-е изд., перераб. и доп. М.: Наука, 1992. 880 с.
14. *Корн Г., Корн Т.* Справочник по математике (для научных работников и инженеров) / И.Г. Араманович (ред.). М.: Наука, 1970. 720 с.

15. *Балашов В.В., Долинов В.К.* Курс квантовой механики. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1982. 280 с.
16. *Gasiorowicz S.* Quantum Physics. 3rd edition. New-York, USA: Wiley, 2003. 352 p.
17. *Liboff R. L.* Introductory quantum mechanics. 3rd ed. Boston, USA: Addison Wesley, 1998. 874 p.
18. *Zettili N.* Quantum mechanics: concepts and applications. New-York, USA: Wiley, 2001. 649 p.
19. *Henner V., Belozeroва T., Forinash K.* Mathematical methods in physics: partial differential equations, Fourier series, and special functions. Boca-Raton, USA: CRC Press, 2008. 859 p.

*Учебное издание*

**Хеннер Виктор Карлович  
Циберкин Кирилл Борисович  
Краузин Павел Васильевич**

**КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ  
ОДНОМЕРНЫЕ ЗАДАЧИ**

Учебное пособие

Редактор \_\_\_\_\_

Корректор \_\_\_\_\_

Компьютерная верстка *К.Б. Циберкина*

Подписано в печать 01.04.2018. Формат 60×84/16.

Усл. печ. л. 7,21. Тираж 100 экз. Заказ \_\_\_\_\_

Издательский центр  
Пермского государственного  
национального исследовательского университета.  
614990, г. Пермь, ул. А.И. Букирева, 15