# ЛЕКЦИЯ № 7

## Электрон - волна

Появление гипотезы де Бройля открыло принципиальную возможность описывать электрон в атоме уже не как частицу, а как волну.

Это в 1926 году сделал австрийский физик Э. Шредингер.

Он применил к электрону в атоме математический аппарат, описывающий движение волны в трехмерном пространстве.

Такое движение описывается математической функцией (её называют "пси"-функцией), в которую входят координаты трехмерного пространства x, y, z.

Оказалось, что квадрат этой функции описывает уже не движение волны, а *вероятность* обнаружить эту волну в точке пространства с координатами x, y, z.

Так появилась возможность рассчитывать вероятность нахождения электрона-волны в разных точках пространства вокруг ядра.

### 4. Уравнение Шредингера

В общем случае поведение квантовой частицы описывается волновой функцией (амплитудой вероятности)

$$\Psi(x,y,z,t)=\Psi_0\exp\left[-i\frac{1}{\hbar}\left(Wt-\vec{p}\vec{r}\right)\right], \tag{7-1}$$

которая является решением дифференциального волнового уравнения Шредингера

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi+W_p\Psi=i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}}, \tag{7-2}$$

– общее (временнóе) уравнение Шредингера,
где $m$ – масса частицы,

$i=\sqrt{-1}$ – мнимая единица,

$\Delta=\dfrac{\partial^2}{\partial x^2}+\dfrac{\partial^2}{\partial y^2}+\dfrac{\partial^2}{\partial z^2}$ – оператор Лапласа.

Для стационарных полей, когда $W_p\neq f(t)$ (в одномерном случае)

$$\Psi(x,t)=\Psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}Wt}\cdot e^{\frac{i}{\hbar}px}.$$

Подставив это выражение в (7-2), после преобразований получим:

$$\boxed{\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(W-W_p\right)\psi(x)=0} \qquad (7\text{-}3)$$

– уравнение Шредингера для стационарного поля.

Решением (7-3) является волновая функция

$$\psi(x)=\psi_0\exp\left(i\frac{1}{\hbar}px\right) \qquad (7\text{-}4)$$

# Границы применимости

С помощью волновых функций, найденных из решений уравнения Шредингера, можно описывать квантовые состояния только нерелятивистских частиц, которые движутся со скоростями, много меньшими скорости света в вакууме

Переход от квантовой теории к классической в уравнении Шредингера можно осуществить, выполняя в нем предельный переход

$$\hbar \to 0$$

Для свободной частицы $W_p = 0$, тогда уравнение Шредингера примет вид:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}W\psi=0$$

# Свободная частица

Что такое свободная частица?

Это частица, на которую не действуют никакие силы.

Как узнать, действуют или не действуют?

Возникает наглядное представление о свободной частице:
на всём белом свете есть одна частица и всё, удалили всю вселенную,
тут заведомо на неё никто не действует, потому что, просто, больше никого нет.

Если свободная частица подчиняется законам классической механики,
то в любой инерциальной системе она либо неподвижна, либо движется
с постоянной скоростью.

Теперь этот объект рассмотрим в рамках уравнения Шредингера.

Слова «свободная частица» означают, что

$$W_{пот} = const \qquad i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi$$

Обозначив

$$\boxed{\frac{2m}{\hbar^2}W = k^2} \tag{7-5}$$

$$\left(\frac{2m}{\hbar^2}W = \frac{2m}{\hbar^2}\cdot\frac{p^2}{2m} = \left(\frac{p}{\hbar}\right)^2 = \left(\frac{2\pi p}{2\pi\hbar}\right)^2 = \left(\frac{2\pi}{\lambda_B}\right)^2 = k^2\right),$$

где $k$ – волновое число квантовой частицы,
получим

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + k^2\psi = 0$$

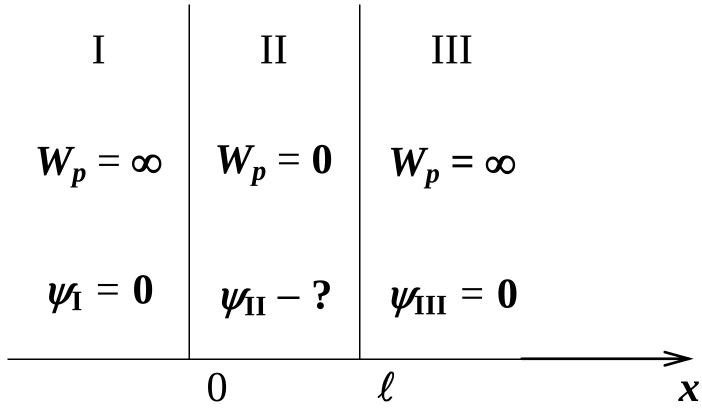
– однородное линейное дифференциальное уравнение второго порядка.

Решением этого уравнения является обычная гармоническая функция вида синуса или косинуса

$$\psi(x) = \psi_0 \sin\left(kx + \varphi_0\right),$$

при этом $k$ – волновое число, а значит и импульс $p$, и энергия частицы $W$ могут быть любыми!

## 5. Квантовая частица в одномерной бесконечно глубокой «потенциальной яме»




$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}W\psi = 0 \quad \text{или} \quad \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + k^2\psi = 0$$

Решением этого уравнения является

$$\psi(x) = \psi_0 \sin\left(kx + \varphi_0\right)$$

Но для $x = 0$ $\quad \psi(0) = 0$, тогда $\varphi_0 = 0$,

для $x = \ell$ $\quad \psi(\ell) = 0$, тогда $\sin(k\ell) = 0$.

$$k\ell = n\pi, \quad n = 1, 2, 3, \ldots .$$

откуда

$$\boxed{k_n = \frac{\pi}{\ell}n}, \quad \boxed{p_n = \hbar k_n = \frac{\pi\hbar}{\ell}n} \quad \text{и} \quad \boxed{W_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m\ell^2}n^2} \qquad (7\text{-}6)$$

где $n = 1, 2, 3, \ldots$ .
– квантование волнового числа, импульса и энергии частицы.

Значит поведение квантовой частицы в различных состояниях (с различными значениями $k_n$, $p_n$ и $W_n$) будет описываться разными волновыми функциями

$$\boxed{\psi(x) = \psi_0 \sin\left(\frac{n\pi}{\ell}x\right)}, \; n = 1, 2, 3, \ldots . \qquad (7\text{-}7)$$

Воспользовавшись условием нормировки волновой функции

$$\int_0^{\ell} \left|\psi(x)\right|^2 dx = 1,$$

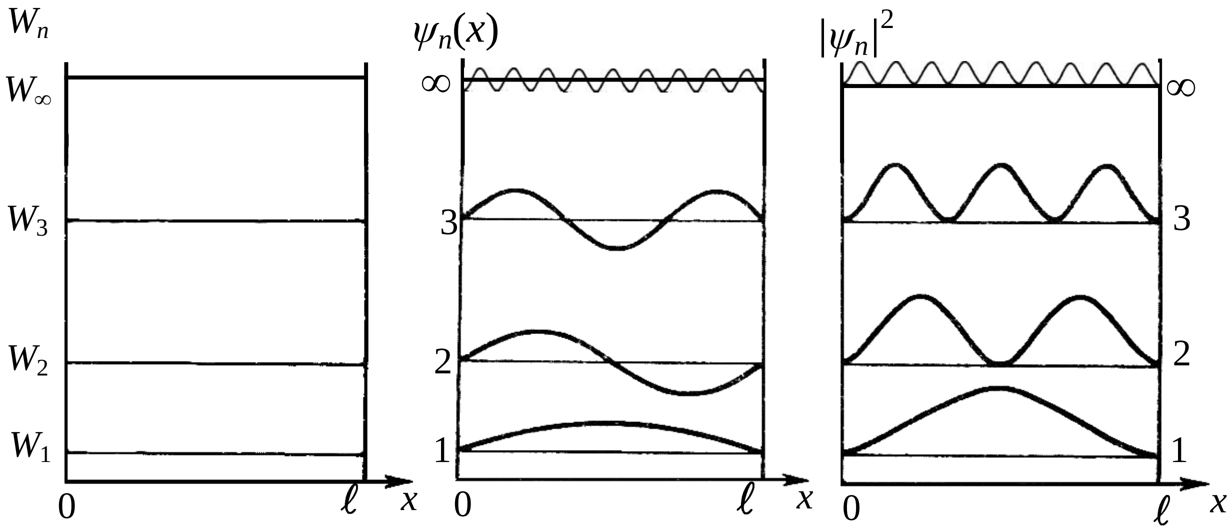
получим выражение для амплитуды $\psi_0$

$$\psi_0 = \sqrt{\frac{2}{\ell}}.$$

Итак, квантовая частица – это волна - волна де Бройля. Но волна в ограниченной области пространства - это стоячая волна, для которой должно выполняться условие:

$$\ell = n\frac{\lambda_B}{2}$$

– условие квантования волн де Бройля.




$$\Delta W_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m\ell^2}(2n+1)$$

## 6. Квантовый гармонический осциллятор

В твердом теле ионы находятся в узлах кристаллической решетки и совершают гармонические колебания у положения равновесия.

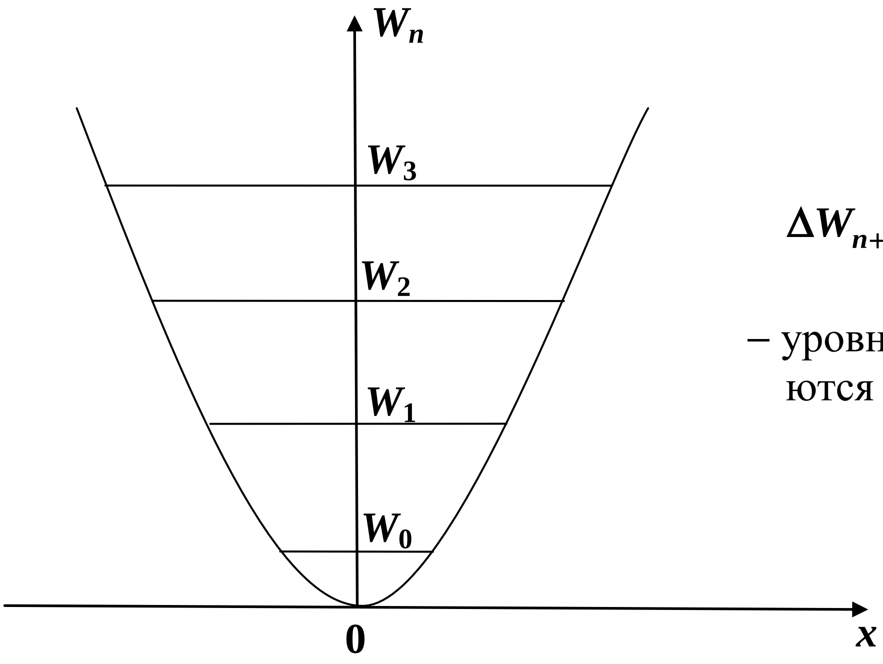
Поэтому эти микрочастицы также можно рассматривать в качестве квантовых гармонических осцилляторов, потенциальная энергия взаимодействия которых описывается выражением

$$W_p = \frac{kx^2}{2} = \frac{m\omega_0^2 x^2}{2}.$$

Тогда подставляем это значение для $W_p$ в уравнение Шредингера (7-3) и, решая его относительно энергии, получаем также, что энергия такой несвободной частицы не может быть любой, она квантуется:

$$W_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_0, \quad n = 0, 1, 2, ..., \infty, \tag{7-8}$$

где $W_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega_0$ – энергия нулевого состояния.




$\Delta W_{n+1,n} = \hbar\omega$

– уровни энергии распологаются **<u>эквидистантно</u>**.

## 7. Влияние формы «потенциальной ямы» на квантование энергии частицы

Энергия частицы складывается из энергии движения $W_k$ и энергии взаимодействия $W_p$

$$W = W_k + W_p.$$

Если частица находится в «потенциальной яме», то $W_k$ может переходить в $W_p$ и наоборот.

$W_k = \frac{p^2}{2m}$, а т. к. частицы обладает волновыми свойствами, то по формуле де Бройля можно вычислить импульс этой частицы через ее длину волны.

$$p = \frac{h}{\lambda_B}.$$

Тогда $W_k = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{2m\lambda_B^2}$.

Потенциальная энергия $W_p = \alpha x^\gamma$,

где $\alpha = \mathrm{const}$

$\gamma = 0$, $W_p = \mathrm{const}$ – свободная частица;

$\gamma = \infty$, $W_p = \beta\left(\frac{x}{\ell}\right)^\gamma$ – прямоугольная бесконечно глубокая «потенциальная яма»;

$\gamma = 2$, $W_p = \alpha x^2$ – гармонический осциллятор.

Для частицы в «потенциальной яме»

$$W_n = W_{k\,\max} = \frac{h^2}{2m\lambda_B^2},$$

откуда

$$\lambda_B = \frac{h}{\sqrt{2mW_n}}$$

$$W_n = W_{p\,\max} = \beta\left(\frac{\ell}{2}\right)^\gamma$$

откуда

$$\ell = 2\left(\frac{W_n}{\beta}\right)^{1/\gamma}$$

Так как частицу в «яме» можно считать стоячей волной, тогда можно воспользоваться условием:

$$\ell = n\frac{\lambda}{2},\ n = 0,\ 1,\ 2\ldots$$

Тогда $2\left(\frac{W_n}{\beta}\right)^{1/\gamma} = n\frac{h}{2\sqrt{2mW_n}}$

откуда

$$W_n^{\frac{1}{\gamma}} \sim \frac{h}{W_n^{1/2}} \to W^{\frac{1}{\gamma}+\frac{1}{2}} - n$$

Окончательно

$$W_n \sim n^{\frac{2\gamma}{\gamma+2}}$$

1) $\gamma = 0$ свободная частица; $W_n = \mathrm{const}$ – любая;

2) $\gamma = \infty$, $W_n \sim n^2$ – частица в бесконечно глубокой «потенциальной яме»;

$$W_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m\ell^2} n^2,\ n = 1, 2\ldots$$

3) $\gamma = 2$, $W_n \sim n$ – квантовый гармонический осциллятор;

$$W_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega,\ n = 0, 1, 2\ldots$$

4) $\gamma = -1$, $W_n \sim n^{-2}$ – электрон в атоме.

Т. о. форма потенциальной ямы очень сильно влияет на квантование энергии частицы.