

1.2. ЭЛЕМЕНТЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ И ФИЗИЧЕСКОЙ СТАТИСТИКИ

Цель лекции: ознакомление с основами квантовой механики и физической статистики.

1.2.1. ВОЛНОВЫЕ СВОЙСТВА ЧАСТИЦ. УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

К началу XX в. было установлено, что атомные явления не могут быть описаны как движение частиц или как чисто волновые процессы. Так, в явлениях дифракции, интерференции проявляется волновая природа света. В фотоэлектрических явлениях, эффекте Комптона (изменение частоты или длины волны фотонов при их рассеянии электронами) свет ведет себя как частица. В 1924 г. французский физик де Бройль выдвинул гипотезу, что с каждым телом должна быть связана плоская волна:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv},$$

где h — постоянная Планка, равная $6,6 \cdot 10^{-34}$ Дж·с; p — импульс; m — масса микрочастицы; v — скорость микрочастицы.

Гипотеза де Бройля получила убедительное экспериментальное подтверждение. На волновых свойствах микрочастиц основана электронная микроскопия, нейтронография. Микрочастицы — электроны, протоны — нельзя представить в виде дробинки, уменьшенной до соответствующих размеров. Качественным отличительным признаком микрочастиц является органическое сочетание в них корпускулярных и волновых свойств.

Поскольку микрочастицы обладают волновыми свойствами, закон их движения должен описываться волновым уравнением. Впервые такое уравнение было записано Э. Шредингером (Австрия) для микрочастицы, движущейся в силовом поле и обладающей потенциальной энергией $u(x, y, z, t)$, в виде

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} \right) - u(x, y, z, t) \Psi,$$

где $i = \sqrt{-1}$; \hbar — постоянная Планка, деленная на 2π .

Функция $\Psi(x, y, z, t)$ является решением этого уравнения и называется волновой функцией. Она имеет следующий физический смысл: произведе-

ние Ψ и функции Ψ^* , комплексно сопряженной с Ψ , пропорционально вероятности того, что в момент времени t микрочастица может быть обнаружена в выделенном объеме dV . Обозначим вероятность обнаружения микрочастицы в объеме dV через $\omega(x, y, z, t)dV$. Тогда

$$\omega(x, y, z, t)dV = \Psi(x, y, z, t)\Psi^*(x, y, z, t)dV.$$

Интеграл $\int \omega dV$, взятый по всему объему, равен единице, так как он выражает достоверный факт, что микрочастица находится в этом объеме, следовательно,

$$\int \Psi\Psi^* dV = 1.$$

Это условие называется условием нормировки, а волновые функции, удовлетворяющие ему, называются нормированными.

Закон движения микрочастицы постоянно определяется заданием функции Ψ в каждый момент времени в каждой точке пространства.

Потенциальная энергия u в общем случае является функцией координат и времени. Однако в большинстве практических задач u является функцией только координат. В этом случае волновую функцию $\Psi(x, y, z, t)$ представляют в виде произведения функций $\Psi(x, y, z)$ и $\varphi(t)$:

$$\Psi(x, y, z, t) = \Psi(x, y, z)\varphi(t). \quad (1.1)$$

Рассмотрим движение микрочастицы вдоль оси x , тогда уравнение Шредингера можно записать в следующем виде:

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} - u(x)\Psi(x, t). \quad (1.2)$$

Подставим уравнение (1.2) в уравнение (1.1):

$$-i\hbar \frac{\partial (\Psi(x)\varphi(t))}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x)\varphi(t)}{\partial x^2} - u(x)(\Psi(x)\varphi(t)).$$

Разделим обе части полученного выражения на $(\Psi(x)\varphi(t))$:

$$-i\hbar \frac{1}{\varphi(t)} \frac{\partial \varphi(t)}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\Psi(x)} \frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} - u(x).$$

Тогда левая часть полученного уравнения зависит только от t , а правая — только от x . Они могут быть равны друг другу в том случае, если каждая равна одной и той же постоянной величине E .

Можно показать, что E есть полная энергия частицы. Приравнявая левую и правую части уравнения $-E$, запишем

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\Psi(x)} \frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} - u(x) = -E,$$

откуда

$$\frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - u_x) \Psi(x) = 0; \quad (1.3)$$

$$-i\hbar \frac{1}{\varphi(t)} \frac{\partial \varphi(t)}{\partial t} = -E.$$

Отсюда получим

$$\frac{\partial \varphi(t)}{\partial t} = -i \frac{E}{\hbar} \varphi(t). \quad (1.4)$$

В общем случае уравнение (1.3) будет содержать вторые производные по другим координатам:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - u) \Psi = 0. \quad (1.5)$$

Через оператора Лапласа уравнение (1.5) можно записать в виде

$$\Delta \Psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - u) \Psi = 0.$$

Функция $\Psi(x, y, z)$, зависящая только от координат, называется амплитудной волновой функцией, а уравнение (1.5) — амплитудным уравнением Шредингера.

Было доказано, что при движении микрочастицы в ограниченной области пространства амплитудное уравнение Шредингера имеет решение только при определенных значениях энергии E : E_1, E_2, \dots, E_n , называемых собственными значениями энергии частицы. Волновые функции $\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_n$, соответствующие этим энергиям, называются собственными волновыми функциями.

Решением уравнения (1.4) является

$$\Psi_n = \exp\left(-i \frac{E_n}{\hbar} t\right),$$

где E_n — одно из собственных значений энергии. Функция $\varphi(t)$ выражает зависимость волновой функции $\Psi(x, y, z, t)$ от времени. Эта зависимость является гармонической с частотой $\nu_n = \frac{E_n}{h}$ или $\omega_n = \frac{E_n}{\hbar}$.

Если потенциальная энергия является функцией только координат, то решение уравнения Шредингера может быть представлено в виде

$$\Psi(x, y, z, t) = \Psi(x, y, z) \exp(-i\omega t).$$

В этом случае вероятность обнаружения частицы в элементе объема

$$\omega dV = \Psi \Psi^* dV$$

и не зависит от времени. Следовательно, распределение вероятности в пространстве является стационарным. Состояния микрочастиц, удовлетворяющие этому условию, называются стационарными состояниями. Амплитудное уравнение описывает стационарное состояние микрочастиц.

1.2.2. ТЕОРЕМА ФЕЛИКСА БЛОХА

Ф. Блох (1905–1983) — один из основоположников современной физики, лауреат Нобелевской премии по физике за создание теории ядерного магнитного резонанса (1952).

С 1924 по 1927 г. он учился в Федеральном институте, где среди его учителей были П. Дебай и Э. Шредингер, затем продолжил обучение в Лейпцигском университете у В. Гейзенберга. В 1928 г. в Лейпциге он получил докторскую степень, защитив диссертацию, посвященную проводимости электронов в металлах. В этой диссертации он сформулировал теорему, определяющую вид волновых функций электрона в металлах (функции Блоха), которая лежит в основе одноэлектронной теории твердых тел.

Согласно теореме Блоха, волновые функции, являющиеся решениями одноэлектронного уравнения Шредингера с периодическим потенциалом, имеющим период решетки, представляют собой плоские стоячие волны, модулированные периодической функцией, т. е.

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\vec{r}},$$

где $u_{\vec{k}}(\vec{r})$ — некоторая периодическая функция с периодом решетки, зависящая от квазиволнового вектора \vec{k} , характеризующего квантовое состояние электрона в кристалле.

Электрон в твердом теле оказывается под влиянием всех близлежащих ядер и электронов, поэтому величина его энергетического уровня неопределенная.

Некоторые из этих энергетических уровней настолько близки друг другу, что возможно существование нескольких различных положений с практически одинаковой энергией. С учетом этого удобно рассматривать не отдельные уровни, а энергетические зоны, состоящие из множества уровней с близкими значениями энергий.

Хотя такие зоны образованы из разрешенных уровней, переходы электронов от уровня к уровню в пределах энергетической зоны подчинены законам квантовых чисел. Энергетические уровни, расположенные за преде-

лами зоны, т. е. в области неразрешенных уровней, недоступны электрону. Движение электронов в пределах энергетической зоны совершается только за счет приобретения или потерь энергии.

1.2.3. СООТНОШЕНИЯ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ ГЕЙЗЕНБЕРГА

К микрочастицам, обладающим волновыми свойствами, применять понятия классической механики, например, понятия координат частицы и ее импульса, можно лишь в ограниченной степени.

Пусть частица движется вдоль оси x и обладает импульсом p_x . Такой частице соответствует волна $\lambda = \frac{h}{p_x}$, являющаяся по своей сущности протяженным объектом. Монохроматическая волна простирается по оси x от $-\infty$ до $+\infty$. Следовательно, интервал локализации микрочастицы Δx равен бесконечности, т. е. микрочастица, имеющая определенный импульс p_x , не имеет определенной координаты x . Можно показать, что микрочастица, имеющая определенную координату, не имеет определенного импульса. В отличие от классической частицы, состояние микрочастицы не может быть охарактеризовано заданием одновременно определенных координат и составляющих импульса. Задать состояние микрочастицы можно, лишь допуская неопределенность в значениях координат и значениях составляющих импульса. Количественно эта неопределенность описывается соотношениями, записанными Гейзенбергом в 1927 г.:

$$\Delta x \Delta p_x \geq h; \quad \Delta y \Delta p_y \geq h; \quad \Delta z \Delta p_z \geq h.$$

Поскольку $p = mv$,

$$\Delta x \Delta v_x \geq \frac{h}{m}; \quad \Delta y \Delta v_y \geq \frac{h}{m}; \quad \Delta z \Delta v_z \geq \frac{h}{m}.$$

Из соотношений неопределенности следует, что чем точнее определяют координаты микрочастицы, тем неопределеннее становятся составляющие импульса. Поэтому бессмысленно говорить о траектории движения микрочастицы, т. е. о совокупности положений движущейся частицы в пространстве.

Соотношение неопределенности существует и между энергией и временем:

$$\Delta E \Delta t \geq h,$$

где Δt — время, в течение которого частица обладает энергией $E \pm \Delta E$.

Из соотношения неопределенности для энергии и времени следует, что неопределенность энергии возрастает при уменьшении времени пребывания микрочастицы в данном энергетическом состоянии.

Тесты к лекции 1.2

1. В чем суть гипотезы де Бройля?

- а) с каждым телом должна быть связана плоская волна;
- б) волновой вектор микрочастицы не определен;
- в) плоская волна определяется волновым вектором.

2. Что описывает уравнение Шредингера?

- а) закон движения микрочастицы;
- б) вероятность прохождения частицы через барьер;
- в) энергетический спектр микрочастицы.

3. Чему равна вероятность обнаружения частицы в элементе объема?

- а) квадрату волновой функции;
- б) квадрату волнового вектора;
- в) квадрату координат.

4. В чем суть теоремы Блоха?

а) волновые функции, являющиеся решениями одноэлектронного уравнения Шредингера с периодическим потенциалом, имеющим период решетки, представляют собой плоские стоячие волны, модулированные периодической функцией;

б) периодические функции одноэлектронного уравнения Шредингера с волновым потенциалом, перекрывающим поле решетки, представляют собой бегущие волны;

в) потенциальные функции с периодическим потенциалом, имеющим период решетки и не являющиеся решениями уравнения Шредингера, представляют собой волновые функции, модулированные периодическим потенциалом.

5. Что описывает амплитудное уравнение Шредингера?

- а) стационарное состояние микрочастиц;
- б) движение микрочастиц в периодическом поле;
- в) вероятность столкновения двух микрочастиц.

6. В чем суть соотношения неопределенности Гейзенберга?

а) чем точнее определяются координаты микрочастицы, тем неопределеннее становятся составляющие импульса;

б) чем точнее определяются размеры микрочастицы, тем неопределеннее становятся ее координаты;

в) чем точнее определяется число частиц в некотором объеме, тем неопределеннее становятся составляющие импульса.