

ется настолько медленно, что удовлетворяется (46,9), то уравнение (47.1) сохраняет свой смысл, так как  $f(r)$  имеет определенное значение. Поскольку область движения много больше  $\Delta x$ , то и положение частицы в пространстве, т. е.  $r$ , а значит, и уравнение (47.2) также сохраняет смысл. Следовательно, частица движется, подчиняясь законам классической механики.

Поскольку длина волны де Бройля  $\lambda = \frac{h}{mv}$  убывает с ростом массы частицы, размеры волнового пакета, т. е. область локализации частицы, уменьшаются и условия (46.9) удовлетворяются во все более широких пределах. Следовательно, для частиц большой массы квантовые законы движения переходят в классические, что и требуется принципом соответствия. Строгое доказательство последнего принадлежит Эренфесту, который доказал, что средние значения динамических переменных (частицы, описываемой уравнением Шредингера) подчиняются классическим уравнениям механики Ньютона.

### § 48. Примеры. Электрон в «ящике». Ротатор и осциллятор

Введенное в предыдущем параграфе уравнение Шредингера позволяет решать практические задачи и находить стационарные и нестационарные состояния движения частиц в различных внешних полях. Отдельные важные примеры могут быть разобраны и без полного решения уравнения Шредингера, используя лишь представление о  $\psi$ -функции как о волне и учитывая ограничения, накладываемые на нее специфическими условиями данной задачи.

**Пример 1.** Электрон в «ящике». В т. II, гл V электрические свойства металлов объяснялись наличием в них свободных электронов. Результирующая сила, действующая на такой электрон со стороны ионов и всех остальных электронов, в среднем равна нулю. Следовательно, потенциальная энергия электрона внутри металла постоянна и ее можно выбрать за начало отсчета и положить равной нулю,

$$U_{\text{внутри}} = 0 \quad (48.1)$$

На границах металла расположен двойной электрический слой (т II, § 22), для преодоления которого нужно затратить работу выхода  $A$ . Поэтому потенциальная энергия электрона вне металла

$$U_{\text{внешн}} = A > 0. \quad (48.2)$$

Для простоты начнем рассмотрение с одномерной задачи.

Направим ось  $x$  перпендикулярно к границам бруска металла длиной  $l$ . Начало координат  $O$  помещено в центр бруска. Потенциальная энергия  $U$  как функция координаты  $x$  показана на рис. 2 13.

Пока кинетическая энергия электрона в металле мала по сравнению с высотой стенок «потенциальной ямы»:

$$E_{\text{кин}} \ll A, \quad (48.3)$$

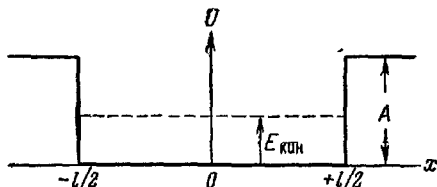


Рис. 2 13

электронные волны будут испытывать на границах потенциальной ямы полное внутреннее отражение и, аналогично световым волнам (см. § 5), практически не просачиваются наружу. В

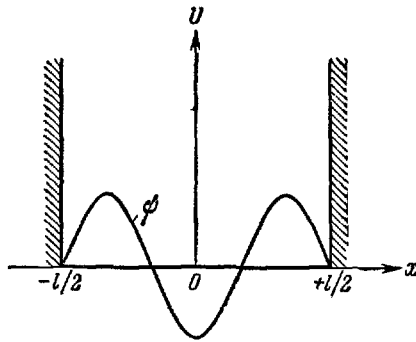


Рис. 2.14.

качестве первого приближения, дающего основные характеристики движения свободных электронов в металле, рассмотрим одномерный «ящик» с энергетически бесконечно высокими стенками ( $A \rightarrow \infty$ ), изображенный схематически на рис. 2.14.  $\psi$ -функция отлична от нуля внутри такого ящика и равна тождественно нулю за его пределами и на самой границе, т. е. там, где электрон не может быть обнаружен.

Двигаясь свободно внутри ящика ( $U = 0$ ), электрон должен сохранять свой импульс  $p_x = \text{const} = p$  и описываться плоской волной типа (47.2). Однако при столкновении со

стенкой импульс должен изменить свой знак на обратный  $p_x = -p$ . Вероятности обоих значений импульса  $\pm p$  одинаковы, и в соответствии с правилами

(47.9) и (47.10)  $\psi$ -функция электрона в ящике должна быть суперпозицией двух плоских волн типа (47.4) с противоположными знаками у  $p_x$  и одинаковыми квадратами амплитуд  $|c_1|^2 = |c_2|^2$ , т. е.  $c_1 = \pm c_2$ . Поэтому

$$\begin{aligned} \psi &= \psi_1 \pm \psi_2 = \\ &= c \left\{ e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)} \pm e^{-\frac{i}{\hbar}(Et + px)} \right\} = \\ &= ce^{-\frac{2\pi i}{h}Et} \left\{ \frac{\cos}{\sin} \right\} \left( \frac{2\pi px}{h} \right). \quad (48.4) \end{aligned}$$

Легко проверить прямой подстановкой, что это выражение  $\psi$  есть частное решение уравнения Шредингера (47.23) для рассматриваемого случая, т. е. когда в области, где  $\psi \neq 0$ , потенциальная энергия  $U(x, y, z) = 0$ . Комплексный множитель

$ce^{-\frac{2\pi i}{h}Et}$  показывает, что волновая функция  $\psi$  есть периодическая функция времени и частоты  $\nu = \frac{E}{h}$ .

Однако непосредственный физический смысл имеет не сама  $\psi$ -функция, а квадрат ее модуля  $|\psi|^2$ , дающий плотность вероятности обнаружения электрона ( $|\psi|^2 dV$  есть вероятность его обнаружения в объеме  $dV$ , см. § 46). Квадрат модуля комплексного множителя

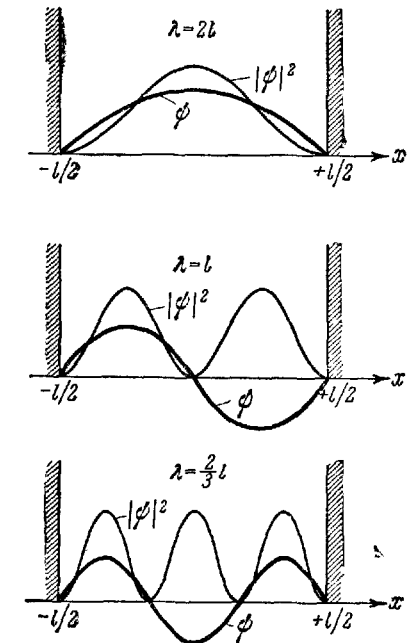


Рис. 2.15.

ля есть постоянная, равная

$$ce^{-\frac{2\pi i}{h}Et} c^* e^{+\frac{2\pi i}{h}Et} = cc^* = |c|^2.$$

Следовательно, функция (48.4) описывает стационарное состояние, в котором распределение вероятности обнаружения электрона в разных участках внутри ящика  $|\psi|^2$  остается неизменным с течением времени.

Второй сомножитель в (48.4),  $\cos$  или  $\sin$  от аргумента

$$\frac{2\pi\rho x}{h} = 2\pi \frac{x}{\lambda},$$

характеризует стоячую волну с длиной  $\lambda = \frac{h}{\rho}$ , образовавшуюся в результате

наложения двух противоположно направленных бегущих волн (47.4). На стенках ящика  $\psi$ -функция должна обращаться в нуль, т. е. эти точки должны быть узлами стоячей волны. Для того чтобы удовлетворить последнему условию, на длине ящика  $l$  должно укладываться целое число ( $n=1, 2, 3, 4, \dots$ ) полуволн, т. е.

$$l = n \frac{\lambda_n}{2} \quad \text{или} \quad \lambda_n = \frac{2l}{n}. \quad (48.5)$$

Числа  $n$  называются «квантовыми» числами. На рис. 2.15 изображены жирными линиями три волны, соответствующие состояниям с наименьшим числом узлов  $\psi$ -функции в ящике ( $n=1, n=2$  и  $n=3$ ). Тонкими линиями на том же рисунке показана плотность вероятности обнаружения электрона, описываемого соответствующей  $\psi$ -функцией, в различных точках внутри ящика, т. е. функция  $|\psi|^2$ .

Каждой длине волны  $\lambda_n$  отвечает значение величины импульса

$$p_n = \frac{h}{\lambda_n} = n \frac{h}{2l}, \quad (48.6)$$

и полная энергия электрона

$$E_n = \frac{p_n^2}{2m} = n^2 \frac{h^2}{8ml^2}. \quad (48.7)$$

Схема этих энергетических уровней изображена на рис. 2.16. При малых  $n$  уровни расположены очень густо, но с ростом номера уровня расстояния между ними расширяются.

Рассмотренная задача об одномерном ящике сама по себе интересна лишь в том смысле, что показывает различие между движением классической и квантовой частицы. Мы разобрали ее, не прибегая непосредственно к решению уравнения Шредингера. Перейдем теперь к рассмотрению физически интересной задачи об электроне в реальном трехмерном ящике. Для электрона малой энергии таким ящиком является брусок металла в виде параллелепипеда с ребрами длиной  $l_1, l_2, l_3$ . В этом случае  $\psi$ -функция должна представлять собой трехмерную волну, которая за пределами ящика, а значит, и на его границах, должна обращаться в нуль. Таким образом, имеем граничные условия — функция  $\psi(x, y, z, t)$  при значениях координат  $x = \pm l_1/2, y = \pm l_2/2, z = \pm l_3/2$  равна нулю:

$$\psi\left(\pm \frac{l_1}{2}, y, z, t\right) = \psi\left(x, \pm \frac{l_2}{2}, z, t\right) = \psi\left(x, y, \pm \frac{l_3}{2}, t\right) = 0. \quad (48.8)$$

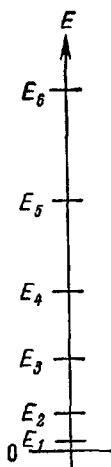


Рис. 2.16.

Для нахождения волновой функции, описывающей стационарное состояние электрона, нужно решить уравнение Шредингера (47.23), с учетом граничных условий (48.8); зависимость волновой функции от времени определяется уравнением (47.22).

Функция  $\psi$  зависит от четырех переменных:  $x$ ,  $y$ ,  $z$  и  $t$ . Мы будем искать ее в виде произведения четырех функций, каждая из которых зависит только от одной переменной

$$\psi(x, y, z, t) = X(x) \cdot Y(y) \cdot Z(z) \cdot T(t). \quad (48.9)$$

Начнем с определения зависимости  $\psi$ -функции от времени. Подставляя (48.9) в (47.22) и сокращая на  $X(x) \cdot Y(y) \cdot Z(z)$ , получим

$$i\hbar \frac{dT}{dt} = ET. \quad (48.10)$$

Мы заменили здесь частную производную  $\frac{\partial}{\partial t}$  на  $\frac{d}{dt}$  в силу того, что  $T$  есть функция только  $t$ . Разделяя переменные, получаем

$$\frac{dT}{T} = \frac{1}{i\hbar} E dt = -\frac{i}{\hbar} E dt,$$

откуда

$$T(t) = c \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} Et}. \quad (48.11)$$

Переходим к решению уравнения Шредингера (47.23). В нашем случае потенциальная энергия электрона в ящике постоянна и, следовательно, может быть принята равной нулю. Значит, уравнение Шредингера запишется так:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) X(x) \cdot Y(y) \cdot Z(z) = EX(x) Y(y) Z(z). \quad (48.12)$$

Поскольку  $U=0$ , полная энергия совпадает с кинетической:

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m}. \quad (48.13)$$

Подставляя это в (48.12) и деля все уравнение на  $\hbar^2/2m$ , получим

$$-YZ \frac{\partial^2 X}{\partial x^2} - XZ \frac{\partial^2 Y}{\partial y^2} - XY \frac{\partial^2 Z}{\partial z^2} = \left( \frac{p_x^2}{\hbar^2} + \frac{p_y^2}{\hbar^2} + \frac{p_z^2}{\hbar^2} \right) XYZ.$$

Это уравнение удобно переписать так:

$$YZ \left( \frac{\partial^2 X}{\partial x^2} + \frac{p_x^2}{\hbar^2} X \right) + XZ \left( \frac{\partial^2 Y}{\partial y^2} + \frac{p_y^2}{\hbar^2} Y \right) + XY \left( \frac{\partial^2 Z}{\partial z^2} + \frac{p_z^2}{\hbar^2} Z \right) = 0. \quad (48.14)$$

Оно будет удовлетворено, если каждая из скобок в отдельности будет равна нулю. Заменяя  $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ , ... на  $\frac{d^2}{dx^2}$ , ... (по той же причине, что и в случае уравнения (47.10)), получим три обыкновенных дифференциальных урав-

нения с граничными условиями, следующими из (48.8):

$$\frac{d^2 X}{dx^2} + \frac{p_x^2}{\hbar^2} X = 0, \quad X(\pm l_1/2) = 0; \quad (48.15a)$$

$$\frac{d^2 Y}{dy^2} + \frac{p_y^2}{\hbar^2} Y = 0, \quad Y(\pm l_2/2) = 0; \quad (48.15б)$$

$$\frac{d^2 Z}{dz^2} + \frac{p_z^2}{\hbar^2} Z = 0, \quad Z(\pm l_3/2) = 0. \quad (48.15в)$$

По форме каждое из этих уравнений тождественно с уравнением гармонических колебаний (коэффициенты перед  $X$ ,  $Y$ ,  $Z$  положительны!), решения которого нам известны (см. т. I). Мы выпишем их в виде

$$X(x) = a_1 \cos \frac{p_x}{\hbar} x + b_1 \sin \frac{p_x}{\hbar} x, \quad (48.16a)$$

$$Y(y) = a_2 \cos \frac{p_y}{\hbar} y + b_2 \sin \frac{p_y}{\hbar} y, \quad (48.16б)$$

$$Z(z) = a_3 \cos \frac{p_z}{\hbar} z + b_3 \sin \frac{p_z}{\hbar} z. \quad (48.16в)$$

Поскольку знаки постоянных  $b_i$  не определены, будем считать  $p_x, \dots$  всегда положительными.

Постоянные  $a_i$  и  $b_i$  должны определяться так, чтобы можно было удовлетворить граничные условия; нужно учесть, что синус и косинус одного и того же аргумента никогда одновременно в нуль не обращаются. Это значит, что если  $a_i \neq 0$ , то  $b_i = 0$  и наоборот. Следовательно, получаем два типа независимых решений — симметричное, когда  $b = 0$  и решение есть четная функция своего аргумента, и антисимметричное, когда  $a = 0$  и решение есть нечетная функция своего аргумента.

Особенно интересно то, что наличие граничных условий допускает для составляющих импульса лишь дискретный ряд возможных значений.

Для симметричного решения  $X(x)$  граничные условия

$$\cos \left( \pm \frac{p_x}{\hbar} \cdot \frac{l_1}{2} \right) = 0 \quad (48.17)$$

удовлетворяются, когда аргумент косинуса равен нечетному числу  $\pi/2$ :

$$\frac{p_x}{\hbar} \cdot \frac{l_1}{2} = n_1 \frac{\pi}{2}, \quad \text{где } n_1 = 1, 3, 5, \dots, \quad (48.18a)$$

откуда допустимый ряд значений составляющей импульса  $p_x$

$$p_{xn_1} = \frac{\pi \hbar}{l_1} n_1 = \frac{h}{2l_1} n_1 \quad (n_1 = 1, 3, 5, \dots). \quad (48.18б)$$

Аналогично граничные условия для антисимметричного решения  $X(x)$

$$\sin \left( \pm \frac{p_x}{\hbar} \cdot \frac{l_1}{2} \right) = 0 \quad (48.19)$$

удовлетворяются при

$$\frac{p_x}{\hbar} \cdot \frac{l_1}{2} = n_2 \frac{\pi}{2}, \quad \text{где } n_2 = 2, 4, 6, \dots, \quad (48.20a)$$

что приводит к возможным значениям составляющей  $p_x$ :

$$p_{x n_2} = \frac{\pi \hbar}{l_1} n_2 = \frac{h}{2l_1} n_2 \quad (n_2 = 2, 4, 6, \dots). \quad (48\ 206)$$

Значение  $n_2 = 0$  обращает волновую функцию в нуль не только на границах, но и во всей области, что означает отсутствие электрона. Следовательно, значение  $n_2 = 0$  недопустимо.

Таким образом,  $x$ -составляющая импульса электрона может принимать значения

$$p_x = \frac{h}{2l_1} n \quad (n = 1, 2, 3, \dots), \quad (48\ 21)$$

где квантовое число  $n$  — любое целое положительное число, но не нуль.

Возможные значения составляющих импульса по двум другим осям находятся аналогично:

$$p_y = \frac{h}{2l_2} k \quad (k = 1, 2, 3, \dots), \quad (48\ 22)$$

$$p_z = \frac{h}{2l_3} s \quad (s = 1, 2, 3, \dots). \quad (48\ 23)$$

Энергия электрона, выражающаяся через составляющие импульса согласно (48.13), будет, таким образом, определяться значением трех квантовых чисел  $n$ ,  $k$  и  $s$ :

$$E_{nks} = \frac{p_{xn}^2 + p_{yk}^2 + p_{zs}^2}{2m} = \frac{h^2}{8m} \left( \frac{n^2}{l_1^2} + \frac{k^2}{l_2^2} + \frac{s^2}{l_3^2} \right), \quad n, k, s = 1, 2, 3, \dots \quad (48\ 24)$$

Эти квантовые числа могут принимать порознь, независимо друг от друга, любые положительные целочисленные значения, но не нуль.

Замечательно, что наименьшая возможная энергия электрона в металле не равна нулю. Определим ее для случая, когда брусок металла представляет собой куб с ребром в 1 см:

$$l_1 = l_2 = l_3 = 1 \text{ см}. \quad (48\ 25)$$

Полагая  $n = k = s = 1$ , найдем

$$E_{111} = \frac{3h^2}{8m} \approx 1,81 \cdot 10^{-33} \text{ дж} = 1,13 \cdot 10^{-14} \text{ эв}. \quad (48\ 26)$$

В этой области расстояние между энергетическими уровнями чрезвычайно мало:

$$E_{112} = E_{121} = E_{211} = \frac{h^2}{8m} (1 + 1 + 2^2) \approx 2,26 \cdot 10^{-14} \text{ эв}. \quad (48\ 27)$$

В металлах плотность электронного газа  $\nu = 10^{21} = 10^{22}$  электрон/см<sup>3</sup>. Интересно оценить по нашей модели энергию уровня Ферми (т. е. энергию наивысшего занятого уровня при  $T = 0^\circ\text{K}$ , когда все без исключения нижние уровни заняты). Учитывая, что в силу принципа Паули каждое состояние с данными значениями  $n$ ,  $k$ ,  $s$  может быть занято лишь двумя электронами, отличающимися направлением спина, и положив для удобства оценки  $\nu = 2 \cdot 8 \cdot 10^{21}$  электрон/см<sup>3</sup>, найдем следующее. Уровню Ферми отвечают значения квантовых чисел  $n = k = s = q = (8 \cdot 10^{21})^{1/3} = 2 \cdot 10^7$ . Таким образом, энергия электронов на уровне Ферми равна

$$E_{qqq} = \frac{3h^2}{8m} (2 \cdot 10^7)^2 \approx 4,5 \text{ эв}. \quad (48\ 28)$$

Можно показать, что эта величина не зависит от размеров куска металла и определяется только плотностью электронного газа в нем.

Для перехода с уровня Ферми на ближайший свободный уровень (в зону проводимости) электрону необходимо сообщить энергию

$$E_{qq(q+1)} - E_{qqq} = \frac{h^2}{8m} [(2 \cdot 10^7 + 1)^2 - (2 \cdot 10^7)^2] = \frac{h^2}{8m} \cdot 4 \cdot 10^7 \approx 1,52 \cdot 10^{-7} \text{ эв.} \quad (48\ 29)$$

Средняя кинетическая энергия теплового движения атомов при комнатной температуре  $\frac{3}{2}kT \approx 0,04 \text{ эв}$ . Отсюда следует, что электроны в окрестностях

уровня Ферми могут участвовать в тепловом движении, легко переходя с одного уровня на другой, т. е. в этом смысле обладают большой подвижностью. Однако участвовать в этом движении может лишь очень малая часть электронов, примерно несколько тысячных от их общего числа. Это — электроны, энергетические уровни которых расположены достаточно близко к уровню Ферми. Для большей их части энергии теплового движения недостаточно, чтобы позволить им перейти на свободный уровень. Этим и объясняется ничтожная теплоемкость электронного газа в металлах (см. т. II, § 21).

Пример 2. Ротатор. Представим себе частицу с массой  $m$ , обладающую одной степенью свободы и способную вращаться со скоростью  $v$  по окружности постоянного радиуса  $r$ , т. е. ротатор. Если частица квантовая, то по этой окружности будет распространяться волна де Бройля. Ее  $\psi$ -функция зависит от аргумента  $\varphi$  — угла поворота вдоль окружности:

$$\psi = A e^{i l \varphi}. \quad (48.30)$$

Угол  $\varphi$  может изменяться от  $-\infty$  до  $+\infty$ . Однако поворот на  $2\pi$  означает возвращение в исходную точку и  $\psi$ -функция должна вернуться к первоначальному значению. Иными словами, должно выполняться соотношение

$$e^{i l (\varphi + 2\pi)} = e^{i l \varphi},$$

или

$$e^{i l 2\pi} = 1.$$

Но

$$e^{i l 2\pi} = \cos(l 2\pi) + i \sin(l 2\pi).$$

Легко видеть, что два равенства

$$\cos(l 2\pi) = 1 \quad \text{и} \quad \sin(l 2\pi) = 0$$

выполняются одновременно, если  $l$  целое число:

$$l = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \quad (48.31)$$

Путь  $s$ , проходимый частицей по ее траектории, связан с углом поворота  $\varphi$  равенством

$$s = r\varphi. \quad (48.32)$$

Момент импульса  $L$  корпускулы, обладающей массой  $m$ , скоростью  $v$  и вращающейся по окружности радиуса  $r$ , равен

$$L = r m v = r p. \quad (48\ 33)$$

При указанном вращении корпускулы вектор импульса все время поворачивается, т. е. не является постоянным, в то время как вектор момента импульса остается неизменным. Поэтому для решения квантовой задачи о ротаторе нужно получить выражение оператора момента импульса  $\hat{L}$ , который позволит с помощью  $\psi$ -функции найти численные значения величины момента импульса квантовой частицы. Оператор  $\hat{L}$ , точнее, оператор

проекция момента, получится, если в классическом выражении для момента (48.33) заменить величину  $p$  ее оператором, уже известным (см. (47.6)):

$$\hat{L}_s = r \hat{p}_s = r \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial s} \right).$$

Замечая, что, согласно (48.32),

$$\frac{\partial}{\partial s} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi},$$

получаем окончательно

$$\hat{L}_\varphi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (48.34)$$

Значение момента импульса ротатора получим, действуя оператором на волновую функцию ротатора (48.30):

$$\hat{L}_\varphi \psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} (A e^{i l \varphi}) = i\hbar l \psi. \quad (48.35)$$

Таким образом, момент импульса жесткого одномерного ротатора равен

$$L_\varphi = i\hbar l. \quad (48.36)$$

Для того чтобы определить возможные энергии ротатора, вычислим, как выражается эта энергия через момент импульса  $L$  в классическом случае. Учитывая (48.33), имеем

$$E = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{L^2}{2mr^2} = \frac{L^2}{2J}, \quad (48.37)$$

где  $mr^2$  в знаменателе есть момент инерции ротатора  $J$ . Подставляя в (48.37) возможные при квантовом рассмотрении значения момента импульса жесткого одномерного ротатора, получим:

$$E_l = l^2 \frac{\hbar^2}{2J}. \quad (48.38)$$

Точный расчет, следующий из решения уравнения Шредингера для пространственного ротатора, показывает, что в этом случае вместо  $l^2$  следует писать  $l(l+1)$ , так что

$$E_l = l(l+1) \frac{\hbar^2}{2J}. \quad (48.39)$$

Дискретность уровней энергии ротатора существенно сказывается на ряде явлений при низких температурах.

Имеем:

$$E_0 = 0, \quad E_1 = \frac{\hbar^2}{J}.$$

Следовательно, минимальная энергия  $E_1$ , которая необходима для возбуждения вращательной степени свободы, обратно пропорциональна моменту инерции  $J$  и при очень малом  $J$  может оказаться очень большой. Для двухатомной молекулы («гантели») момент инерции относительно оси, проходящей через центры атомов, столь мал, что  $E_1 \gg kT$ , и эта степень свободы при тепловом движении не возбуждается. При малых температурах прекращается вращение и относительно других осей — вращательные степени свободы «вымерзают», что приводит к соответствующему уменьшению теплоемкости (см. т. I, § 33).



Пример 3. Одномерный осциллятор. Гармонический осциллятор с массой  $m$ , кроме кинетической энергии, обладает и потенциальной энергией. Для одномерного осциллятора (см. т. I, § 52) эта потенциальная энергия является квадратичной функцией смещения  $x$  из положения равновесия:

$$U(x) = \frac{1}{2} kx^2. \quad (48.40)$$

Вид этой функции показан на рис. 2.17.

Кинетическая энергия при одномерном движении

$$K = \frac{p_x^2}{2m}. \quad (48.41)$$

В классической механике такой осциллятор совершает гармонические колебания с собственной частотой

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m}}. \quad (48.42)$$

Амплитуда колебаний  $A$  и полная энергия  $E \sim A^2$  могут принимать любые значения от 0 до  $\infty$ .

В квантовой механике  $\psi$ -функция и возможные значения энергии определяются из уравнения Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2} kx^2\psi = E\psi. \quad (48.43)$$

Это уравнение необходимо решить точно, так как различные элементарные соображения, использованные в предыдущих примерах, здесь оказываются несостоятельными из-за наличия переменной потенциальной энергии (48.40).

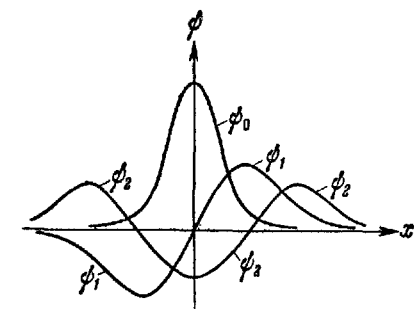


Рис. 2.18.

ние вероятности обнаружения осциллятора далеко от положения равновесия, т. е.

$$\text{при } x \rightarrow \pm \infty, \psi(x) \rightarrow 0. \quad (48.44)$$

В результате решения уравнения (48.43) с граничным условием (48.24) оказывается, что энергия осциллятора может принимать лишь дискретные

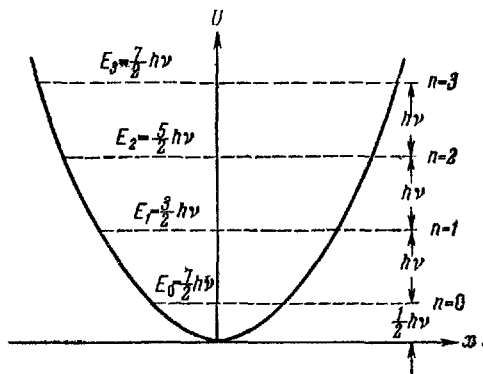


Рис. 2.17.

В классической механике осциллятор, обладающий энергией  $E_1$ , имеет амплитуду  $A_1 = \sqrt{\frac{2E_1}{k}}$  и координата колеблющейся частицы всегда заключена в интервале

$$-A_1 \leq x \leq +A_1.$$

В квантовой механике  $\psi$ -функция осциллятора отлична от нуля и вне этих пределов. Единственным условием, наложенным на  $\psi$ -функцию, является достаточно быстрое убыва-

значения

$$E_n = \left( n + \frac{1}{2} \right) h\nu, \quad n=0, 1, 2, 3, \dots \quad (48.45)$$

Эти возможные уровни энергии показаны на рис. 2.17 пунктиром. На рис. 2.18 приведен вид волновых функций  $\psi_0$ ,  $\psi_1$  и  $\psi_2$  для первых трех значений энергии.

Минимальная энергия осциллятора оказывается не равной нулю, как это получалось при классическом рассмотрении. Ее значение

$$E_0 = \frac{1}{2} h\nu. \quad (48.46)$$

Далее все энергетические ступеньки имеют одну и ту же высоту

$$E_{n+1} - E_n = \left( n + 1 + \frac{1}{2} \right) h\nu - \left( n + \frac{1}{2} \right) h\nu = h\nu. \quad (48.47)$$

Как показывает дальнейший теоретический анализ, квантовый электрический осциллятор (диполь) может при взаимодействии с электромагнитным полем переходить лишь на соседние уровни — вверх (с поглощением фотона) или вниз (с испусканием). При этом частота фотона равна собственной частоте осциллятора  $\nu$ , а его энергия равна разности энергий между двумя соседними уровнями осциллятора, т. е.  $h\nu$ . Таким образом, осциллятор частоты  $\nu$  испускает излучение той же частоты  $\nu$ , как и в классической теории. Существенное различие состоит в м е х а н и з м е излучения: классический осциллятор испускает излучение непрерывно, постепенно затухая при этом.

Квантовый осциллятор в стационарном состоянии совершает колебания, ничего не излучая. Излучение возникает лишь при переходе осциллятора из данного энергетического состояния в ближайшее нижнее. При этом вся энергия, теряемая осциллятором, отдается с одним единственным, возникающим в момент перехода фотоном. Будучи в состоянии с минимальной энергией

$E_0 = \frac{1}{2} h\nu$ , осциллятор колеблется, но излучения испустить не может.

То же относится к поглощению излучения. Классический осциллятор способен черпать энергию из поля излучения непрерывно, так же непрерывно увеличивая амплитуду колебаний. Квантовый осциллятор поглощает излучение (частоты  $\nu$ ) порциями, поднимаясь скачком на ближайший энергетический уровень.

---