6. ТЕОРИЯ АТОМА ВОДОРОДА ПО БОРУ

§ 6.1. Основные законы и формулы.

1. Обобщенная формула Бальмера, описывающая серии в спектре водорода:

$$\nu = R\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right),$$

где ν - частота спектральных линий в спектре атома водорода; R - постоянная Ридберга; m - определяет серию (m=1, 2, 3,...); n - определяет отдельные линии соответствующей серии (n=m+1, m+2,...): m=1 (серия Лаймана), m=2 (серия Бальмера), m=3 (серия Пашена), m=4 (серия Брэкета), m=5 (серия Пфунда), m=6 (серия Хэмфри).

2. Первый постулат Бора (постулат стационарных состояний):

$$m_e \upsilon_n r_n = nh(n = 1,2,3,\ldots),$$

где m_e - масса электрона; υ_n - скорость электрона по n-й орбите радиусом r_n.

3. Второй постулат Бора (правило частот):

$$h\nu = E_n - E_m,$$

где E_n и E_m - соответственно энергии стационарных состояний атома до и после излучения (поглощения).

4. Энергия электрона на n-й стационарной орбите:

$$E_n = -\frac{1}{n^2}\frac{z^2 m_e e^4}{8h^2\varepsilon_0^2} \quad (n = 1, 2, 3, \ldots),$$

где z - порядковый номер элемента в системе Менделеева; ε_0 - электрическая постоянная.

§ 6.2. Примеры решения задач.

6.2.1. *Определить радиус орбиты r_1 электрона для стационарного состояния атома водорода. Определить скорость электрона при его движении по этой орбите и циклическую частоту вращения, считая массу электрона бесконечно малой по сравнению с массой ядра.*

Решение

Так как масса электрона бесконечно мала по сравнению с массой ядра, то можно считать ядро неподвижным. Тогда закон движения электрона в кулоновском поле ядра имеет вид

$$\frac{m\upsilon_1^2}{r_1} = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_1^{\ 2}}, \tag{1}$$

где m, e, υ - масса, заряд и скорость электрона. Из правила квантования орбит следует, что для первой стационарной орбиты (n=1)

$$m\upsilon_1 r_1 = h. \tag{2}$$

Из выражений (1) и (2) следует:

$$r_1 = \frac{4\pi\varepsilon_0 h^2}{me^2} = 0{,}53 \cdot 10^{-10} \quad м, \ \upsilon_1 = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 h} = 2{,}2 \cdot 10^6 \quad м/с.$$

Зная период обращения $T_1 = \dfrac{2\pi r_1}{\upsilon_1}$ электрона по орбите, можно найти циклическую частоту: $\omega_1 = \dfrac{2\pi}{T_1} = \dfrac{\upsilon_1}{r_1} = 4{,}2 \cdot 10^{16} \quad \dfrac{рад}{с}$.

6.2.2. *Какую наименьшую энергию в электрон-вольтах должны иметь электроны, чтобы при возбуждении атомов водорода ударами этих электронов появились все линии всех серий спектра водорода? Какую при этом наименьшую скорость должны иметь эти электроны?*

Решение

Все линии всех серий спектра водорода появятся при ионизации атома водорода. Энергия ионизации равна работе, совершаемой при удалении электрона с нормальной орбиты (где n=1) в бесконечность (где n=∞). Тогда

$$E_i = h\nu = hcR\left(\frac{1}{k^2} - \frac{1}{n^2}\right), \tag{1}$$

где R - постоянная Ридберга, k и n - номера орбиталей.

Подставив k=1, n=∞, получим:

$$E_i = hcR = 13{,}6 \quad эВ.$$

Такую энергию должны иметь электроны, чтобы ионизировать атом водорода. При этом появятся все линии спектра. Скорость электронов, соответствующую этой энергии, найдем из соотношения, выражающего закон сохранения энергии:

$$\frac{m\upsilon^2_{min}}{2} = E_i.$$

Отсюда $\upsilon_{min} = \sqrt{\frac{2E_i}{m}} = 2{,}2 \times 10^6 \ \frac{м}{с}$, где m - масса электрона.

6.2.3. *Определить скорость, которую приобрел покоившийся атом водорода в результате излучения фотона при переходе из первого возбужденного состояния в основное. На сколько процентов отличается энергия испущенного фотона от энергии данного перехода?*

Решение

Согласно законам сохранения энергии и импульса

$$\varepsilon = h\omega + \frac{m\upsilon^2}{2}, \tag{1}$$

$$\frac{h\omega}{c} = m\upsilon, \tag{2}$$

где в последней формуле слева записан импульс фотона; m, υ - масса и скорость атома водорода; $h\omega$ - энергия фотона.

Энергия возбуждения атома:

$$\varepsilon = hcR\left(\frac{1}{k^2} - \frac{1}{n^2}\right) = \frac{3}{4}hRc, \tag{3}$$

где k=1, n=2.

Решая совместно (1) и (2), получим квадратное уравнение для V:

$$\upsilon^2 + 2c\upsilon - \frac{2E}{m} = 0, \tag{4}$$

положительный корень которого дается выражением с учетом (3):

$$\upsilon = c\left(\sqrt{\frac{3hR}{2mc} + 1} - 1\right) \approx 3{,}27 \ \frac{м}{с}.$$

Далее $\frac{\Delta\varepsilon}{\varepsilon} \times 100\% = \frac{m\upsilon^2}{2E} \times 100\% = \frac{2m\upsilon^2}{3hRc} \times 100\% \approx 5{,}5 \cdot 10^{-7}\%.$

6.2.4. *Атом в основном состоянии поглотил квант света с длиной волны* *λ=121,5 нм. Определить радиус r электронной орбиты возбужденного атома водорода.*

Решение

Длина волны света, поглощенного атомом водорода при переходе электрона с одной орбиты на другую, задается выражением:

$$\frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{n_1{}^2} - \frac{1}{n_2{}^2}\right). \qquad (1)$$

Поскольку первоначально атом водорода находился в основном состоянии, то полагая в (1) n_1=1 и выражая n_2, которое считаем равным n (n_2=n), получаем:

$$n = \sqrt{\frac{\lambda R}{\lambda R - 1}}. \qquad (2)$$

После подстановки численных значений $\lambda=1{,}215\times10^{-7}$ м, $R=1{,}1\times10^{7}$ м$^{-1}$ получим n=2, то есть электрон переходит на вторую орбиту. Для расчета ее радиуса запишем уравнение квантования и второй закон Ньютона для движения электрона на n-й орбите: $m\upsilon r = nh$, (3)

$$\frac{m\upsilon^2}{r} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r^2}. \qquad (4)$$

Решаем систему уравнений (3) , (4) относительно r, после чего получаем:

$$r = n\frac{4\pi\varepsilon_0 h^2}{me^2} = \sqrt{\frac{\lambda R}{\lambda R - 1}}\frac{4\pi\varepsilon_0 h^2}{me^2}; \qquad (5)$$

подставив сюда численные значения величин, получим ответ:

$$r = 2{,}11\times10^{-10} \text{ м}.$$

6.2.5. *Вычислить энергию ε фотона, испускаемого при переходе электрона в атоме водорода с пятого энергетического уровня на второй, и его частоту.*

Решение

Энергия электрона, находящегося на n-й орбите, дается формулой:

$$E_n = -\frac{me^4}{32\pi^2\varepsilon_0{}^2h^2n^2}. \qquad (1)$$

Энергия фотона равна разности энергий электрона на n_1=5 и n_2=2 энергетических уровнях. Подставляя в (1) поочередно эти значения и вычисляя разность полученных величин, находим:

$$\varepsilon = E_{n1} - E_{n2} = \frac{me^4}{32\pi^2\varepsilon_0{}^2h^2n^2}\left(\frac{1}{4} - \frac{1}{25}\right). \qquad (2)$$

После подстановки численных значений находим:

$$\varepsilon=2{,}86 \text{ эВ} = 4{,}57\times10^{-19} \text{ Дж}.$$

Частоту находим после деления этой величины на постоянную Планка:

$$\omega = \frac{\varepsilon}{h} = 4{,}35\cdot10^{15} \quad c^{-1}.$$

§ 6.3. Задачи для самостоятельного решения.

53. Вычислить радиус первой орбиты атома водорода (Боровский радиус) и скорость электрона на этой орбите.

54. Вычислить радиусы r_2 и r_3 второй и третьей орбит в атоме водорода.

55. Определить скорость электрона на второй орбите атома водорода и частоту обращения электрона на этой же орбите.

56. Определить потенциальную *П*, кинетическую *T* и полную *E* энергии электрона, находящегося на первой орбите атома водорода.

57. Определить длину волны λ, соответствующую третьей спектральной линии в серии Бальмера.

58. Найти наибольшую λ_{max} наименьшую λ_{min} длины волн в первой инфракрасной серии спектра водорода (серии Пашена).

59. Вычислить энергию ε и частоту ν фотона, испускаемого при переходе электрона в атоме водорода с третьего энергетического уровня на первый.

60. Определить наименьшую ε_{min} и наибольшую ε_{max} энергии фотона в ультрафиолетовой серии спектра водорода (серии Лаймана).

61. Какую наименьшую энергию в электрон-вольтах должны иметь электроны, чтобы при возбуждении атомов водорода ударами этих электронов появились все линии всех серий спектра водорода? Какую при этом наименьшую скорость должны иметь эти электроны?

62. Фотон с энергией ε = 16,5 эВ выбил электрон из невозбужденного атома водорода. Какую скорость υ будет иметь электрон вдали от ядра атома?

63. Вычислить частоты f_1 и f_2 вращения электрона в атоме водорода на второй и третьей орбитах. Сравнить эти частоты с частотой υ излучения при переходе электрона с третьей на вторую орбиту.

64. Атом водорода в основном состоянии поглотил квант света с длиной волны λ = 121,5 нм. Определить радиус r электронной орбиты возбужденного атома водорода.

65. Определить первый потенциал U_i возбуждения атома водорода.

66. Атом в основном состоянии поглотил квант света с длиной волны λ = 121,5 нм. Определить радиус r электронной орбиты возбужденного атома водорода.

7. ВОЛНОВЫЕ СВОЙСТВА ЧАСТИЦ

§ 7.1. Основные законы и формулы.

1. Соотношения де Бройля для энергии и импульса частицы:

$$E = \hbar\omega, \ p = \hbar k,$$

где ω - частота дебройлевской волны; $k = \dfrac{2\pi}{\lambda}$ - волновое число.

2. В релятивистском случае связь длины волны со скоростью частицы

$$\lambda = \frac{h}{m_0\upsilon}\sqrt{1-\frac{\upsilon^2}{c^2}},$$

где m_0 - масса покоя частицы, c - скорость света.

3. Соотношение неопределенностей Гейзенберга:

$$\Delta x \Delta p_x \gtrsim \hbar,$$

где Δx и Δp_x - неопределенности координаты и соответствующей компоненты импульса частицы.

4. Связь длины волны де Бройля с кинетической энергией К частицы в классическом приближении: $\lambda = \dfrac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_0 T}}$; в релятивистском случае $\lambda = \dfrac{2\pi\hbar c}{\sqrt{T(T+2E_0)}}$,

где $E_0=mc^2$ - энергия покоя частицы.

5. Постоянная Планка: $h = 2\pi\hbar$.

§ 7.2. Примеры решения задач.

7.2.1. *Вычислить дебройлевскую длину волны электрона и протона, движущихся с кинетической энергией 2 кэВ. При каких значениях кинетической энергии их длина волны будет 100 пм?*

Дано: $T=2\times10^3$ эВ = $3{,}2\times10^{-16}$ Дж;

$\lambda=100$ пм = 1×10^{-10} м.

Найти: $\lambda_1, \lambda_2, E_1, E_2$ = ?

Решение

Связь импульса с кинетической энергией частицы дается выражением:

$$\frac{p^2}{2m} = T. \tag{1}$$

Длина волны связана с импульсом при помощи выражения:

$$p = hk = \frac{h}{\lambda}. \tag{2}$$

Подставляя (2) в (1) и выражая далее длину волны, получаем:

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mT}}. \tag{3}$$

В это выражение подставим массы электрона m_1=9,1×10^{-31} кг, протона m_2= 1,67×10^{-27} кг и значение энергии T:

$$\lambda_1 = 2{,}76\times10^{-11}\ \text{м},\ \lambda_2 = 6{,}45\times10^{-13}\ \text{м}.$$

Выражая из (3) энергию, получим

$$T = \frac{h^2}{2m\lambda^2}. \tag{4}$$

Подставляя сюда значение λ, а также приведенные выше массы электрона и протона, получим:

$$T_1 = 2{,}4\times10^{-17}\ \text{Дж} = 0{,}15\ \text{кэВ}\ ,\ T_2 = 1{,}31\times10^{-20}\ \text{Дж} = 0{,}082\ \text{эВ}.$$

7.2.2. *При какой скорости электрона его длина волны равна комптоновской длине?*

Решение

Если для длины волны электрона воспользоваться нерелятивистской формулой:

$$\lambda = \frac{h}{m_0\upsilon}, \tag{1}$$

и приравнивая ее компоновской длине электрона:

$$\lambda_k = \frac{h}{m_0 c}, \tag{2}$$

то получим, что скорость электрона должна равняться скорости света, что противоречит основным принципам теории относительности. Поэтому для длины волны электрона целесообразно использовать релятивистскую формулу:

$$\lambda = \frac{h}{m_0\upsilon}\sqrt{1-\beta^2}, \tag{3}$$

где $\beta = \frac{V}{c}$, а c - скорость света. Приравняв между собой (3) и (2), получим:

$$\beta^2 = 2; \qquad \upsilon = \frac{c}{\sqrt{2}}.$$

7.2.3. *Найти кинетическую энергию электронов, падающих нормально на диафрагму с двумя узкими щелями, если на экране , отстоящем от диафрагмы на l=75 см, расстояние между соседними максимумами Δx=7,5 мкм. Расстояние между щелями d=25 мкм.*

Дано: l=0,75 м;

$d=2,5\times10^{-5}$ м;

$\Delta x=7,5\times10^{-6}$ м.

Найти: T=?

Решение

При интерференции волн от двух источников, которыми в данном случае являются две щели, возникает картина из чередующихся максимумов и минимумов.

Расстояние Δx между соседними максимумами дается выражением:

$$\Delta x = \frac{l\lambda}{d}, \tag{1}$$

где λ - длина волны падающих на диафрагму с щелями электронов. Учтем приведенную в задаче связь длины волны частиц с их энергией:

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mT}}. \tag{2}$$

Подставляя (2) в (1) и выражая из полученной формулы энергию, получим:

$$T = \frac{1}{2m}\left(\frac{lh}{\Delta x d}\right)^2, \tag{3}$$

что после подстановки численных значений величин и $m=9,1\times10^{-31}$ кг, дает:

$$T=38,4\times10^{-19} \text{ Дж} = 24 \text{ эВ}.$$

7.2.4. *Плоский поток частиц падает нормально на диафрагму с двумя узкими щелями, образуя на экране дифракционную картину. Показать, что попытка определить, через какую щель прошла та или иная частица (например, с помощью индика-*

тора И) приводит к разрушению дифракционной картины. Углы дифракции считать малыми.

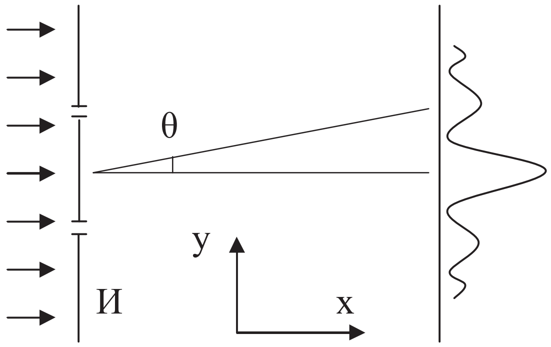

Рис 7.1.

Решение

Пусть θ - угол между нормалью к плоскости щелей и лучем. Чтобы установить, через какую щель прошла частица, ее y - координата должна быть определена индикатором И с погрешностью $\Delta y < \frac{d}{2}$, где d - расстояние между щелями. В соответствии с соотношением неопределенностей это означает, что индикатор должен вносить неопределенность в y - проекцию импульса частицы:

$$\Delta p_y \geq \frac{2h}{d}. \quad (1)$$

В то же время условие того, что дифракционная картина не будет нарушена, есть $\Delta p_y << p\theta,$ (2)

где $p = \frac{h}{\lambda}$, $\theta \approx \frac{\lambda}{d}$, λ - длина волны частицы. То есть (2) принимает вид:

$$\Delta p_y << \frac{h}{d}. \quad (3)$$

Таким образом, вносимая индикатором неопределенность импульса Δp_y оказывается значительно большей (1), чем неопределенность Δp_y, при которой дифракционная картина сохраняется (3), что, естественно, ее уничтожает.

7.2.5. *Электрон с кинетической энергией T=10 эВ локализован в области размером l =1 мкм. Определить относительную неопределенность скорости электрона.*

Дано: T=10 эВ=$1{,}6\times10^{-18}$ Дж;

l =1 мкм=10^{-6} м.

Найти: $\Delta\upsilon/\upsilon$=?

Решение

Согласно принципу неопределенности

$$\Delta p \Delta x \sim h, \tag{1}$$

где $\Delta p = m\Delta\upsilon$ - неопределенность импульса, а $\Delta x = \frac{1}{2}$ - неопределенность координаты. Выражая отсюда $\Delta\upsilon$, получим:

$$\Delta\upsilon \sim \frac{2h}{ml}. \tag{2}$$

С другой стороны, между скоростью и кинетической энергией есть связь

$$T = \frac{m\upsilon^2}{2} \tag{3}$$

или

$$\upsilon = \sqrt{\frac{2T}{m}} \tag{4}$$

Деля (2) на (4), получим:

$$\frac{\Delta\upsilon}{\upsilon} \sim \frac{2h}{l}\sqrt{\frac{1}{2Tm}},$$

что после подстановки численных значений величин дает $\frac{\Delta\upsilon}{\upsilon} = 1{,}2 \cdot 10^{-4}$.

§ 7.3. Задачи для самостоятельного решения.

67. Электрон, начальной скоростью которого можно пренебречь, прошел ускоряющую разность потенциалов U. Найти длину волны де Бройля λ для двух случаев: 1) U_1 = 5 В; 2) U_2 = 510 кВ.

68. Вычислить дебройлевскую длину волны электрона и протона, движущихся с кинетической энергией 2 кэВ. При каких значениях кинетической энергии их длина волны будет 100 пм?

69. При какой скорости электрона его длина волны равна комптоновской длине?

70. Электрон движется со скоростью 200 Мм/с. Определить длину волны де Бройля λ, учитывая изменение массы электрона в зависимости от скорости.

71. Найти длину волны де Бройля λ для электрона, движущегося по круговой орбите атома водорода, находящегося в основном состоянии.

72. Определить длину волны де Бройля λ, электрона, находящегося на второй орбите атома водорода.

73. Определить длину волны де Бройля λ электронов, бомбардирующих антикатод рентгеновской трубки, если граница сплошного рентгеновского спектра приходится на длину волны $\lambda = 3$ нм.

74. Электрон движется по окружности радиусом $r = 0{,}5$ см в однородном магнитном поле с индукцией $B = 8$ мТл. Определить длину волны де Бройля λ электрона.

75. На узкую щель шириной $a = 1$ мкм направлен параллельный пучок электронов, имеющих скорость $\upsilon = 3{,}65$ Мм/с. Учитывая волновые свойства электронов, определить расстояние x между двумя максимумами интенсивности первого порядка в дифракционной картине, полученной на экране, отстоящем на $L = 10$ см от щели.

76. Найти кинетическую энергию электронов, падающих нормально на диафрагму с двумя узкими щелями, если на экране, отстоящем от диафрагмы на $\ell = 75$ см, расстояние между соседними максимумами $\Delta x = 7{,}5$ мкм. Расстояние между щелями $d = 25$ мкм.

77. На грань кристалла никеля падает параллельный пучок электронов. Кристалл поворачивают так, что угол скольжения θ изменяется. Когда этот угол делается равным 64°, наблюдается максимальное отражение электронов, соответствующее дифракционному максимуму первого порядка. Принимая расстояние d между атомными плоскостями кристалла равным 200 пм, определить длину волны де Бройля λ электронов и их скорость υ.

78. Известно, что фазовая скорость $\upsilon = \omega/k$. Найти выражения фазовой скорости волн де Бройля в нерелятивистском и релятивистском случаях.

79. Кинетическая энергия T электрона в атоме водорода составляет величину порядка 10 эВ. Используя соотношение неопределенностей, оценить минимальные линейные размеры атома.

80. Определить неточность Δx в определении координаты электрона, движущегося в атоме водорода со скоростью $\upsilon = 1{,}5 \cdot 10^6$ м/с, если допускаемая неточность $\Delta\upsilon$ в определении скорости составляет 10% от ее величины. Сравнить полученную неточность с диаметром d атома водорода, вычисленным по теории Бора для основного состояния, и указать, применимо ли понятие траектории в данном случае.

81. Электрон с кинетической энергией $T = 15$ эВ находится в металлической пылинке диаметром $d = 1$ мкм. Оценить относительную неточность $\Delta\upsilon$, с которой может быть определена скорость электрона.

82. Во сколько раз дебройлевская длина волны λ частицы меньше неопределенности Δx ее координаты, которая соответствует относительной неопределенности импульса в 1%?

83. Приняв, что минимальная энергия E нуклона в ядре равна 10 МэВ, оценить, исходя из соотношения неопределенностей, линейные размеры ядра.

84. Рассмотрим следующий мысленный эксперимент. Пусть моноэнергетический пучок электронов (T = 10 эВ) падает на щель шириной a. Можно считать, что если электрон прошел через щель, то его координата известна с неточностью $\Delta x = \alpha$. Оценить получаемую при этом относительную неточность в определении импульса $\Delta p/p$ электрона.

85. Пылинки массой $m = 10^{-12}$ г взвешены в воздухе и находятся в тепловом равновесии. Можно ли установить, наблюдая за движением пылинок, отклонение от законов классической механики? Принять, что воздух находится при нормальных условиях, пылинки имеют сферическую форму. Плотность вещества, из которого состоят пылинки, равна $2 \cdot 10^3$ кг/м^3.

86. Используя соотношение неопределенности $\Delta E \Delta t \geq \hbar$ оценить ширину Г энергетического уровня в атоме водорода, находящегося: 1) в основном состоянии; 2) в возбужденном состоянии (время τ жизни атома в возбужденном состоянии равно 10^{-8} c).

87. Используя соотношение неопределенностей энергии и времени, определить естественную ширину $\Delta\lambda$ спектральной линии излучения атома при переходе его из возбужденного состояния в основное. Среднее время τ жизни атома в возбужденном состоянии принять равным 10^{-8} с, а длину волны λ излучения–равной 600 нм.

8. УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

§ 8.1. Основные законы и формулы.

1. Вероятность нахождения частицы в объеме dV:

$$dW = \psi\psi^* dV = |\psi|^2 dV,$$

где $\psi = \psi(x, y, z, t)$ - волновая функция, описывающая состояние частицы; ψ^* -

функция, комплексно сопряженная с ψ; $|\psi|^2 = \psi\psi^*$ - квадрат модуля волновой функции.

Для стационарных состояний

$$dW = \psi\psi^* dV = |\psi|^2 dV,$$

где $\psi = \psi(x, y, z)$ - координатная (амплитудная) часть волновой функции.

2. Условие нормировки вероятностей:

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dV = 1,$$

где интегрирование производится по всему бесконечному пространству, то есть по координатам x, y, z от $-\infty$ до $+\infty$.

3. Вероятность обнаружения частицы в интервале от x_1 до x_2:

$$W = \int\limits_{x_1}^{x_2} |\psi(x)|^2 dx.$$

4. Среднее значение физической величины L, характеризующей частицу, находящуюся в состоянии, описываемом волновой функцией ψ:

$$\langle L \rangle = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} L|\psi|^2 dV.$$

5. Общее уравнение Шредингера (уравнение Шредингера, зависящее от времени): $-\dfrac{h^2}{2m}\Delta\psi + U(x, y, z, t)\psi = ih\dfrac{\partial \Psi}{\partial t}$,

где $\psi = \psi(x, y, z, t)$ - волновая функция, описывающая состояние частицы; $h = \dfrac{h}{(2\pi)}$; m-масса частицы, Δ-оператор Лапласа $\left(\Delta\psi = \dfrac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \dfrac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \dfrac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right)$; $i = \sqrt{-1}$ - мнимая единица; $U = U(x, y. z, t)$ - потенциальная энергия частицы в силовом поле, в котором она движется.

6. Уравнение Шредингера для стационарных состояний.

$$\Delta\psi + \frac{2m}{h^2}(E - U)\psi = 0,$$

где $\psi = \psi(x, y, z)$ - координатная часть волновой функции $\left(\psi(x, y, z, t) = \right.$ $\left.= \psi(x, y, z)e^{-i(E/h)t}\right)$; $U = U(x, y, z)$ - потенциальная энергия частицы; E - полная энергия частицы.

§ 8.2. Примеры решения задач.

8.2.1. *Частица массы m находится в одномерной прямоугольной потенциальной яме шириной* l *с бесконечно высокими стенками. Найти собственные значения энергии частицы и ее нормированные собственные функции.*

Решение

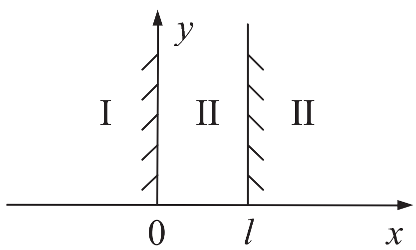

Рис. 8.1

Уравнение Шредингера в одномерном случае имеет вид

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{h^2}(E - U(x))\psi = 0. \tag{1}$$

Здесь, как следует из условия, $U(x) = \begin{cases} \infty & x \le 0 \\ 0 & 0 < x < l \\ \infty & x \ge l \end{cases}$ (2)

Поскольку за пределами потенциальной ямы $U(x)$ обращается в бесконечность, частица туда попасть не может. Значит там волновая функция, как и на границах ямы, должна обращаться в нуль. Отсюда имеем для $\psi(x)$ граничные условия:

$$\psi(0) = \psi(l) = 0. \quad (3)$$

В области ямы $0 < x < l$ уравнение (1) имеет вид

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{h^2}E\psi = 0. \quad (4)$$

Решение его имеет вид $\psi(x) = A\sin(kx + \alpha)$, где A, α - константы, а $k^2 = \frac{2m}{h^2}E$. Подставляя для x значения x=0 и x=l, получим из граничных условий (3):

$$\begin{aligned} &\psi(0) = A\sin\alpha = 0, && \alpha = 0, \\ &\psi(l) = A\sin kl = 0, && kl = \pm\pi n, \quad n = 1,2,3\dots\ . \end{aligned} \quad (5)$$

Из уравнения для k с условием (5) получаем собственные значения энергии:

$$E_n = \frac{\pi^2 h^2}{2ml^2} n^2\ ,\ n=1,2,3\dots\ . \quad (6)$$

Спектр энергии дискретен. Этим значениям энергии соответствуют волновые функции:

$$\psi_n(x) = A\sin\frac{n\pi x}{l}. \quad (7)$$

Множитель А можно найти из условия нормировки $\int\limits_{-\infty}^{\infty}|\psi|^2 dx = 1$, которое в нашем случае принимает вид

$$A^2\int\limits_0^l \sin^2\frac{n\pi x}{l}dx = 1. \quad (8)$$

Отсюда, взяв интеграл, получим $A = \sqrt{\frac{2}{l}}$. Тогда окончательно собственные функции имеют вид $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\frac{n\pi x}{l}$, n=1,2,3... .

8.2.2. *Частица массы m находится в одномерном симметричном потенциальном поле глубиной U_0 (рис. 8.2). Найти спектр собственных значений энергии E при условии $E< U_0$..*

Решение

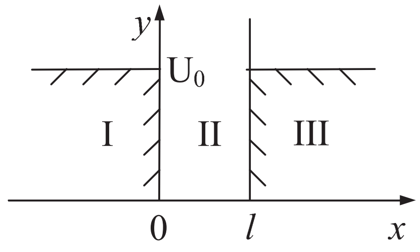

Рис. 8.2

Уравнение Шредингера имеет вид

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{h^2}\left(E - U(x)\right)\psi = 0, \tag{1}$$

где $$U(x) = \begin{cases} U_0, & x \le 0, \\ 0, & 0 < x < l, \\ U_0, & x \ge l. \end{cases} \tag{2}$$

Рассмотрим решения этого уравнения во всех трех областях:

$$x \le 0, \qquad \psi_1 = Ae^{\gamma x}, \qquad \gamma = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{h^2}}, \tag{3}$$

$$0 < x < l, \qquad \psi_2 = B\sin(kx + \alpha) \;\; k = \sqrt{\frac{2mE}{h^2}}, \tag{4}$$

$$x \ge l, \qquad \psi_3 = C\, e^{-\gamma x}. \tag{5}$$

Волновая функция и ее производная должна быть всюду непрерывны. Применим это условие в точках x=0 и x=l:

$$x = 0, \qquad \psi_1(0) = \psi_2(0), \qquad A = B\sin\alpha, \tag{6}$$

$$\psi'_1(0) = \psi'_2(0), \qquad \gamma A = kB\cos\alpha. \tag{7}$$

$$x = l, \qquad \psi_2(l) = \psi_3(l), \qquad B\sin(kl + \alpha) = Ce^{-\gamma l}, \tag{8}$$

$$\psi'_2(0) = \psi'_3(l), \qquad kB\cos(kl + \alpha) = -\gamma Ce^{-\gamma l}. \tag{9}$$

После деления (6) на (7) получим $tg\alpha = \frac{k}{\gamma}$.

Отсюда с использованием известного соотношения $\sin\alpha = \frac{tg\alpha}{\sqrt{1+tg^2\alpha}}$

получаем $$\sin\alpha = \frac{hk}{\sqrt{2mU_0}}. \tag{10}$$

Проведя для точки x=l аналогичные операции, получаем

$$\sin(kl+\alpha) = -\frac{hk}{\sqrt{2mU_0}}. \tag{11}$$

Исключив из (10) и (11) α, получим:

$$kl = n\pi - 2\arcsin\left(\frac{hk}{\sqrt{2mU_0}}\right), \tag{12}$$

где n=1,2,3...n. Значения arcsin берутся в первой четверти (от 0 до $\pi/2$). Поскольку аргумент у arcsin не может быть больше единицы, то значения k не могут превосходить $k_{max} = \sqrt{\frac{2mU_0}{h}}$.

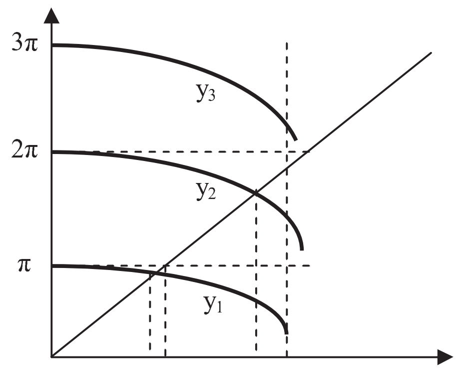

Рис. 8.3

Изобразим левую и правую части уравнения (8) как функцию от k (рис. 8.3), где y_1, y_2 и y_3 - правая часть уравнения при n=1,2,3). Точки пересечения прямой с кривыми y_1, y_2 и так далее определяют корни этого уравнения, которые, как видно из рисунка, дают дискретный спектр собственных значений E.

При уменьшении U_0 величина k_{max} перемещается влево - число точек пересечения будет уменьшаться (при заданном l положение прямой остается неизменным). Когда k_{max} становится меньше k', яма будет иметь только один уровень энергии. Таким образом, данная яма всегда содержит по крайней мере один уровень энергии.

8.2.3. *Частица массы m находится в основном состоянии в одномерной потенциальной яме шириной l с бесконечно высокими стенками. Найти: а) силу, давления, которую оказывает частица на стенку, б) работу, которую необходимо совершить, чтобы медленно сжать яму в η раз.*

Решение

Как известно из механики, сила, действующая на стенку, перпендикулярную оси x, есть среднее значение производной от энергии частицы по длине ямы вдоль оси x. Согласно формуле, полученной в задаче (8.2.1) для основного состояния с n=1. $E = \frac{\pi^2 h^2}{2ml^2}$, взяв отсюда производную по l, получим:

$$F = -\frac{dE}{dl} = \frac{\pi^2 h^2}{ml^3}.$$

Работу, совершаемую при сжатии ямы, можно найти как разность энергии в двух конечных положениях стенки ямы:

$$A = E\left(\frac{l}{\eta}\right) - E(l) = \frac{\pi^2 h^2}{2ml^2}\left(\eta^2 - 1\right).$$

8.2.4. *Частица массы m находится в трехмерной прямоугольной потенциальной яме с абсолютно непроницаемыми стенками. Длина ребер ямы равна a, в, c. Найти собственные значения энергии частицы и ее собственные волновые функции.*

Решение

Абсолютная непроницаемость стенок говорит о том, что волновая функция может быть отличной от нуля только внутри ямы, которую в данном случае часто называют потенциальным ящиком. Поэтому для волновых функций, являющихся решением уравнения Шредингера, должны выполняться нулевые граничные условия:

$$\psi\big|_{x=0} = \psi\big|_{x=a} = \psi\big|_{y=0} = \psi\big|_{y=B} = \psi\big|_{z=0} = \psi\big|_{z=c} = 0. \quad (1)$$

Одномерный аналог такой ямы рассмотрен в задаче 8.2.1. Повторяя те же рассуждения только для трех переменных x, y, z, можно получить решение задачи с учетом граничных условий (1).

Запишем уравнение Шредингера внутри ямы:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} + k\psi = 0, \quad (2)$$

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{h}.$$

Его решение удобно искать сразу в виде произведения синусов:

$$\psi(x, y, z) = A\sin(k_1 x)\sin(k_2 y)\sin(k_3 z), \quad (3)$$

так как при x=0, y=0 и z=0 волновая функция должна обращаться в нуль. Возможные значения k_1, k_2 и k_3 находим из граничных условий:

$$k_1 = \frac{n_1\pi}{a},\ k_2 = \frac{n_2\pi}{в},\ k_3 = \frac{n_3\pi}{c}.$$

После подстановки $\psi(xyz)$ в уравнение Шредингера получим:

$$k^2 = k_1^2 + k_2^2 + k_3^2 \text{ или } E = \frac{\pi^2 h^2}{2m}\left(\frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{в^2} + \frac{n_3^2}{c^2}\right). \quad (4)$$

Постоянную A в выражении для волновой функции находим из условия нормировки:

$$\int_\Omega |\psi|^2 dV = 1, \quad (5)$$

где Ω - область внутри ямы, dv - элемент объема .

Так как функция (3) представляет произведение трех сомножителей, каждый из которых зависит лишь от одной переменной, то (5) можно представить в виде

$$A^2\int_0^a \sin^2(k_1 x)dx\int_0^в \sin^2(k_2 y)dy\int_0^c \sin^2(k_3 z)dz = 1.$$

Отсюда для A получим выражение: $A = \sqrt{\dfrac{8}{a\,вc}}$ и волновые функции примут вид

$$\psi(xyz) = \sqrt{\frac{8}{a\,вc}}\sin\frac{n_1\pi x}{a}\sin\frac{n_2\pi y}{в}\sin\frac{n_3\pi z}{c}.$$

8.2.5. *Найти уровни энергии и соответствующие им волновые функции для частицы, представляющей собой одномерный гармонический осциллятор с потенциальной энергией* $U = \frac{m\omega_0^2}{2}x^2$.

Решение

Зависимость потенциальной энергии частицы от координаты x имеет параболический вид. Классическим осциллятором может служить математический маятник при малых углах отклонения (груз, подвешенный на пружине). Решение задачи для квантового гармонического осциллятора имеет большое значение в приложениях, так как движение любой системы частиц, совершающих малые колебания, может быть сведено к движению совокупности независимых осцилляторов.

Уравнение Шредингера для осциллятора имеет вид

$$-\frac{h^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{m\omega_0^2}{2}x^2\psi = E\psi. \tag{1}$$

Для решения этого уравнения введем безразмерные величины:

$$\xi = \frac{x}{x_0},\quad x_0 = \sqrt{\frac{h}{m\omega_0}},\quad \lambda = \frac{2E}{h\omega_0}. \tag{2}$$

Рассматривая ψ как функцию ξ после элементарных преобразований, приведем уравнение (1) к виду

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} + \left(\lambda - \xi^2\right)\psi = 0. \tag{3}$$

Нам нужно найти конечные непрерывные и однозначные решения этого уравнения в интервале $-\infty < \xi < +\infty$. Такие решения уравнение (3) имеет не при всех значениях параметра λ, а лишь при

$$\lambda=2n+1,\quad n=0, 1, 2\ldots . \tag{4}$$

Причем соответствующие функции ψ_n равны

$$\psi_n(\xi) = e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi), \tag{5}$$

где $H_n(\xi)$ - полином Чебышева-Эрмита n-го порядка, определяемый формулой

$$H_n(\xi) = \frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n n\sqrt{\pi}}} e^{\xi^2} \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n}. \tag{6}$$

При этом множитель перед e^{ξ^2} выбран так, что функция $\psi_n(\xi)$ нормирована по ξ к 1:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n{}^2(\xi)d\xi = 1. \qquad (7)$$

Согласно (2) параметр λ определяет энергию. Сравнивая (2) и (4), находим, что возможные ее значения:

$$E_n = h\omega_0\left(n + \frac{1}{2}\right),\ n=0,\ 1,\ 2,\ 3.... \qquad (8)$$

Число n называется главным квантовым числом. Выпишем несколько функций (5) нормированных по x на1: $\psi_0(x) = \dfrac{1}{\sqrt{x_0\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{x^2}{2x_0{}^2}}$, $\quad n = 0;$

$$\psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2x_0\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{x^2}{2x_0{}^2}} \cdot \frac{2x}{x_0}, \quad n = 1.$$

§ 8.3. Задачи для самостоятельного решения.

88. Электрон находится в бесконечно глубоком прямоугольном одномерном потенциальном ящике шириной *l* (рис.8.1). Написать уравнение Шредингера и его решение (в тригонометрической форме) для области *II* ($0<x<l$).

89. Известна волновая функция, описывающая состояние электрона в потенциальном ящике шириной l: $\psi(x) = C_1 \sin kx + C_2 \cos kx$ Используя граничные условия $\psi(0)=0$ и $\psi(l) = 0$ определить коэффициент C_2 и возможные значения волнового вектора k, при котором существуют нетривиальные решения.

90. Электрон находится в потенциальном ящике шириной l = 0,5 им. Определить наименьшую разность ΔE энергетических уровней электрона. Ответ выразить в электрон-вольтах.

91. Электрон находится в потенциальном ящике шириной *l*. В каких точках в интервале ($0 < x < l$)плотность вероятности нахождения электрона на первом и втором энергетических уровнях одинакова? Вычислить плотность вероятности для этих точек. Решение пояснить графически.

92. В одномерном потенциальном ящике шириной l находится электрон. Вычислить вероятность W нахождения электрона на первом энергетическом уровне в интервале 1/4, равноудаленном от стенок ящика.

93. Электрон с энергией E = 25 эВ встречает на своем пути потенциальный барьер высотой U = 9 эВ. Определить коэффициент преломления n волн де Бройля на границе барьера.

94. Определить коэффициент преломления n волн де Бройля для протонов на границе потенциальной ступени. Кинетическая энергия протонов равна 16 эВ, а высота U потенциальной ступени равна 9 эВ.

95. Электрон обладает энергией E = 10 эВ. Определить, во сколько раз изменятся его скорость v, длина волны де Бройля λ и фазовая скорость при прохождении через потенциальный барьер высотой U = 6 эВ.

96. Протон с энергией E = 1 МэВ изменил при прохождении потенциального барьера дебройлевскую длину волны на 1 %. Определить высоту U потенциального барьера.

97. Определить показатель преломления n волн де Бройля при прохождении частицей потенциального барьера с коэффициентом отражения ρ = 0,5.

98. При каком отношении высоты U потенциального барьера и энергии E электрона, падающего на барьер, коэффициент отражения ρ = 0,5.?

99. Вычислить коэффициент прохождения τ электрона с энергией E = 100 эВ через потенциальный барьер высотой U = 99, 75 эВ.

100. На низкий потенциальный барьер падает моноэнергетический поток электронов. Концентрация n_0 электронов в падающем потоке равна 10^9 мм$^{-3}$, а их энергия E = 100 эВ. Определить давление, которое испытывает барьер, если его высота U = 9,7 эВ.

101. Найти вероятность W прохождения электрона через прямоугольный потенциальный барьер при разности энергий U — E = 1 эВ, если ширина барьера: 1) d = 0,1 нм; 2) d = 0,5нм.

102. Электрон проходит через прямоугольный потенциальный барьер шириной d = 0,5 нм. Высота U барьера больше энергии E электрона на 1 %. Вычислить коэффициент прозрачности D, если энергия электрона: 1) E = 10 эВ; 2) E = 100 эВ.

103. Ширина d прямоугольного потенциального барьера равна 0,2 нм. Разность энергий U – E =1 эВ. Во сколько раз изменится вероятность W прохождения электрона через барьер, если разность энергий возрастет в n = 10 раз?

104. Ядро испускает α-частицы с энергией E = 5 МэВ. В грубом приближении можно считать, что α-частицы проходят через прямоугольный потенциальный барьер высотой U = 10МэВ и шириной d = 5 фм. Найти коэффициент прозрачности D барьера для α-частиц.

105. Протон и электрон прошли одинаковую ускоряющую разность потенциалов $\Delta\varphi$ = 10 кВ. Во сколько раз отличаются коэффициенты прозрачности D_e для электрона и D_p для протона, если высота U барьера равна 20 кэВ и ширина d=0,1 пм?