# Движение свободной частицы

В этом и последующих параграфах мы рассмотрим несколько примеров движения микрочастиц в условиях, когда их волновые свойства определяют характер движения и энергию частиц. При этом очень существенно различать два случая: когда на частицу не действуют никакие силы (свободное движение) и движение частицы под действием различных сил (несвободное движение). Отличие этих двух случаев состоит в том, что важнейшая характеристика движущейся частицы — ее энергия $E$ — при наличии сил, действующих на частицу, не может принимать любые значения. Если частица, помимо кинетической энергии $K$, обладает потенциальной энергией $U$, то ее полная энергия $E$ оказывается величиной ***квантованной***. **Физическая величина называется квантованной, если она может принимать лишь ряд определенных дискретных значений.**

Вначале рассмотрим случай, когда частица с массой $m$ движется с постоянной скоростью $\upsilon$ вдоль некоторого направления, выбранного за ось $x$, причем нет никаких сил, действующих на частицу,— ее движение свободно. Импульс частицы $p = m\upsilon$, а длина волны де Бройля $\lambda = h/p$. Движению частицы вдоль оси $x$ соответствует распространяющаяся в этом же направлении волна де Бройля, характеризуемая волновым числом $k = 2n/\lambda$. Уравнение плоской волны, распространяющейся вдоль оси $x$ и имеющей определенную частоту $v$ и волновое число $k$, имеет вид :

$s = A \cos(\omega t - kx)$, где $A$ — амплитуда волны.

В квантовой механике показывается, что общим уравнением плоской дебройлевской волны является выражение

$$\psi = A(\cos\alpha - i\sin\alpha), \qquad (26.11)$$

где $$\alpha = \omega t - kx = \frac{E}{\hbar}t - \frac{p}{\hbar}x. \qquad (26.12)$$

Здесь $E$ и $p$ — энергия и импульс частицы, $i$ — мнимая единица (т. е. $i^2 = -1$).

Вероятность обнаружить частицу в объеме ΔV определяется по формуле $|\psi|^2 = \psi\psi^*$ есть квадрат модуля ψ-функции, т. е. произведение ψ на ψ*-функцию, комплексно-сопряженную с ψ (иными словами, отличающуюся от ψ знаком при мнимой единице). Вычисляя произведение $\psi\psi^*$, получим

$$|\psi|^2 = \psi\psi^* = A(\cos\alpha + i\sin\alpha)\cdot A(\cos\alpha - i\sin\alpha) =$$
$$= A^2(\cos^2\alpha - i\cos\alpha\sin\alpha + i\sin\alpha\cos\alpha + \sin^2\alpha) = A^2.$$

Итак, имеется постоянная, не зависящая от времени интенсивность волны де Бройля. В соответствии с физическим смыслом волн де Бройля **это показывает, что имеется постоянная, одинаковая вероятность обнаружить частицу в любой точке на оси *x*.**

С точки зрения соотношений неопределенностей свободное движение частицы с точно заданным импульсом $p$ означает, что положение частицы на оси $x$ становится совершенно неопределенным. Об этом же говорит одинаковая вероятность обнаружить частицу во всех точках оси $x$. Частица может двигаться с любой скоростью $\upsilon$, которой соответствует энергия $E = m\upsilon^2/2$, принимающая вместе со скоростью $\upsilon$ любые возможные значения.

Выразим энергию частицы через длину волны де Бройля $\lambda$. По формуле $\lambda = h/m\upsilon$, откуда $\upsilon = h/m\lambda$. Подставив это в выражение энергии, получим

$$E = \frac{m\upsilon^2}{2} = \frac{\hbar^2}{2m\lambda^2}. \qquad (26.13)$$

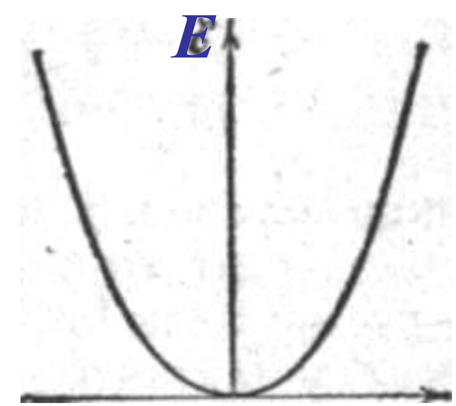


Рис. 26.1

Наконец, учитывая, что $\lambda = 2\pi/k$, можно выразить энергию $E$ через волновое число $k$:

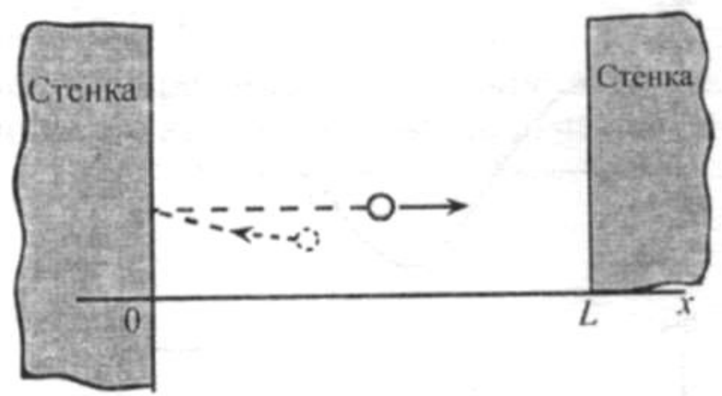
$$E = \frac{k^2h^2}{8\pi^2 m} = \frac{k^2\hbar^2}{2m}. \qquad (26.14)$$

На рис. 26.1 изображена парабола, выражающая зависимость энергии $E$ свободной частицы от волновых чисел $k$ дебройлевских волн частицы, т. е. от скорости $\upsilon = \hbar k/m$.

# Частица в потенциальной яме прямоугольной формы

Рассмотрим теперь микроскопическую частицу, движение которой вдоль оси $x$ ограничено следующим образом. От начала координат $x = 0$ до точки $x = L$ частица движется свободно. Однако она не может выйти за пределы области $(0, L)$. Это значит, что на границах области $(0, L)$, в точках $x = 0$ и $x = L$, потенциальная энергия $U$ частицы становится равной бесконечности. Можно представить себе, например, что частица движется по дну плоского ящика с идеально отражающими бесконечно высокими стенками. В таком случае говорят, что частица находится внутри бесконечно глубокой потенциальной ямы и ее движение ограничено некоторым потенциальным барьером.

Рис. 26.1



Разумеется, таких ям практически не существует. Однако при изучении электропроводности металлов мы пользуемся представлением о том, что свободные (валентные) электроны металла находятся внутри потенциального ящика с плоским дном, причем высота потенциального барьера равна работе выхода электрона из металла. Таким образом, задача, о которой пойдет речь, является упрощенной моделью реальной и очень важной физической задачи.

В этой задаче мы встречаемся с ограничением движения частицы. Она находится внутри прямоугольной ловушки — заперта в ней.

**Форма ловушки зависит от потенциальной энергии частицы**.

В данном случае потенциальная энергия частицы весьма просто зависит от координаты $x$: если $x < 0$ или $x > L$, то $U = \infty$; если $0 \leq x \leq L$, то $U = 0$.

Рассмотрим теперь поведение дебройлевской волны, связанной с частицей, движущейся внутри прямоугольной ловушки. На стенках ящика происходит отражение волны, и в результате внутри потенциальной ямы при наложении падающей и отраженной волн должны образоваться стоячие дебройлевские волны. Аналогичную картину мы имеем при рассмотрении стоячих волн в струне, закрепленной на обоих концах.

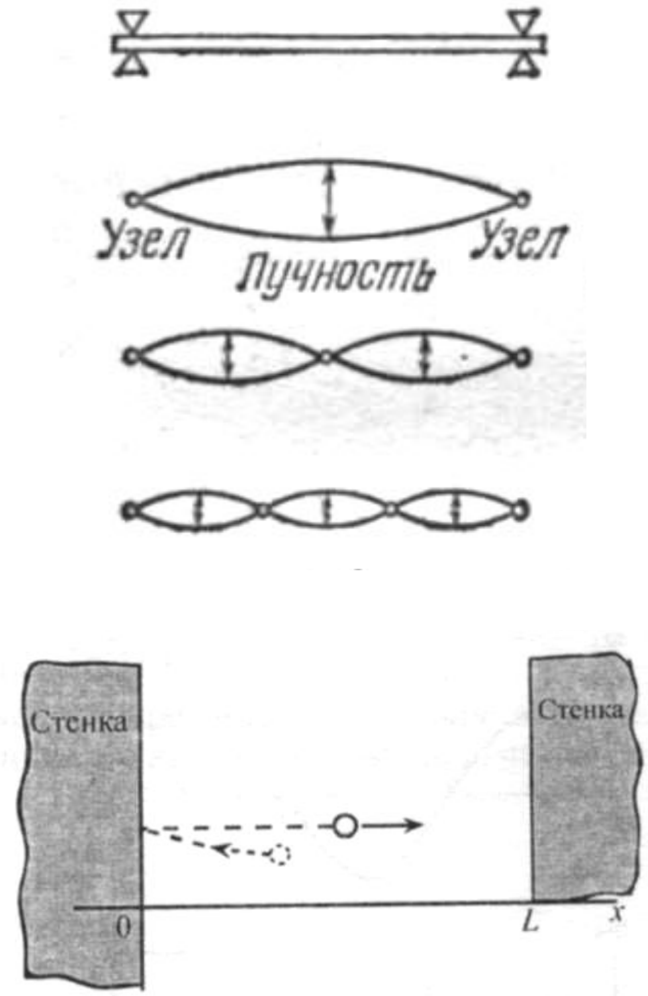



Рис. 26.1

Пусть длина струны равна $L$, а скорость волны в нем $\upsilon$. При возбуждении колебаний в струне установится стоячая волна, причем на концах обязательно получатся узлы, а между ними — одна либо несколько пучностей. Но расстояние между двумя узлами равно половине длины волны, следовательно, на длине стержня уложится целое число полуволн:

$$L = n\lambda_n/2 \quad \text{или} \quad \lambda_n = 2L/n \quad (\text{где } n = 1, 2, 3, \ldots). \qquad (26.15)$$

Выразив длину волны через частоту колебаний и скорость распространения волны, получим значения собственных частот:

$$\omega = n\pi\upsilon/L, \qquad \nu = \omega/2\pi = n\upsilon/2L.$$

Таким образом, длина стоячей волны не может быть произвольной. Она зависит от целых чисел $n$, поэтому и обозначена через $\lambda_n$. Существует некоторый дискретный набор длин волн, которые могут установиться в закрепленной струне.

Очевидно, что эти рассуждения применимы и к дебройлевской волне частицы, движущейся внутри прямоугольной ловушки. **На длине потенциальной ямы должно уложиться целое число полуволн де Бройля.** Формулу (26.13) теперь запишем несколько иначе:

$$E_n = \frac{m\upsilon_n^2}{2} = \frac{h^2}{2m\lambda_n^2}. \qquad (26.13')$$

Индекс $n$ у скорости $\upsilon$ и энергии $E$ показывает, что скорость и энергия частицы в потенциальной прямоугольной ловушке не могут иметь произвольных значений. **Вместе с длиной волны λ скорость и энергия будут квантованными величинами, принимающими лишь определенные дискретные значения**. Подставим в (26.13') значения $\lambda_n$ из (26.15). Получим

$$E_n = \frac{m\upsilon_n^2}{2} = \frac{n^2 h^2}{8mL^2}. \quad (n = 1,2,3,\ldots.) \qquad (26.16)$$

Формула (26.16) показывает, что **частица, запертая внутри потенциальной ловушки прямоугольной формы, может иметь квантованные значения энергии, прямо пропорциональные квадратам целых чисел *n*.**

До сих пор речь шла о любой микроскопической частице, обладающей волновыми свойствами и запертой внутри ловушки. Предположим теперь для определенности, что мы говорим об электроне, находящемся в потенциальной ловушке. Квантованные значения $E_n$ называются ***уровнями энергии***, а числа $n$, определяющие энергетические уровни электрона, называются *квантовыми числами*. Таким образом, электрон в потенциальной яме может находиться на определенном энергетическом уровне.

Иногда говорят, что **он находится в определенном стационарном квантовом состоянии *n***. Этим подчеркивается, что состояние электрона с энергией $E_n$ не зависит от времени и электрон может в отсутствие внешних воздействий находиться в этом состоянии как угодно долго.

Очень важно, что электрон не может обладать энергией, не совпадающей с одним из энергетических уровней. Дозволенными являются только такие энергии электрона в потенциальном ящике прямоугольной формы, которые совпадают с энергетическими уровнями, определяемыми формулой (26.16).

Рассмотрим влияние линейных размеров ловушки на квантование энергии. Покажем, что квантование энергии становится существенным лишь в том случае, когда линейные размеры потенциального ящика соизмеримы с размерами атома $L = 1$ нм $=$ $=10^{-9}$ м. Для этого вычислим разность $\Delta E$ энергий электрона, находящегося на двух соседних энергетических уровнях $E_n+1$ и $E_n$. По формуле (26.16) имеем

$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = \frac{h}{8mL^2}[(n+1)^2 - n^2] = (2n+1)\frac{h^2}{8mL^2}. \quad (26.16')$$

Подставим в формулу (26.16') численные значения $h = 6{,}62 \cdot 10^{-34}$ Дж·с и $m = 9{,}1 \cdot 10^{-31}$ кг для электрона, находящегося в потенциальном ящике с линейными размерами $L = 10^{-9}$ м, соизмеримыми с размерами атома. Мы получим

$$\Delta E = (2n+1)\frac{(6{,}62 \cdot 10^{-34})^2}{8 \cdot 9{,}1 \cdot 10^{-31} \cdot 10^{-18}} = (2n+1) \cdot 0{,}38\,\textbf{эВ}.$$

«Расстояние» между соседними энергетическими уровнями с ростом $n$ возрастает пропорционально ряду нечетных чисел ($2n+1$).

Для ящика макроскопических размеров $L = 10^{-2}$ м аналогично получим следующие результаты:

$$\Delta E = (2n+1)\frac{(6{,}62 \cdot 10^{-34})^2}{8 \cdot 9{,}1 \cdot 10^{-31} \cdot 10^{-4}} = (2n+1) \cdot 3{,}8 \cdot 10^{-15}\,\textbf{эВ}.$$

Энергетические уровни расположены в этом случае столь тесно, что можно считать эти уровни практически непрерывными. Они образуют густо расположенную последовательность ***квазинепрерывных уровней***. Квантование энергии электрона в ловушке макроскопических размеров дает результаты, несущественно отличающиеся от результатов классической физики, где энергия электрона может принимать любые значения, т. е. может изменяться непрерывно. Заметим, что при $L \to \infty$ последовательность уровней становится строго непрерывной, так как $\Delta E \to 0$.

При обсуждении роли соотношений неопределенностей для описания движений мы видели, что при макроскопическом движении частицы можно не принимать во внимание ограничений, которые вносят соотношения неопределенностей в возможность описывать движение с помощью понятия о траектории. Наоборот, при движении электрона в атоме, где он заперт в ловушке с линейными размерами порядка размеров атома, понятие о траектории частицы становится неправомерным.

Теперь мы видим, что в случае ловушки макроскопических размеров энергия электрона также ведет себя классическим образом: она может принимать произвольные непрерывные значения. Совершенно иную картину мы имеем в случае, когда электрон заперт в ловушке атомных размеров. Здесь не только теряет смысл понятие о траектории электрона, важнейшая его характеристика — энергия — оказывается квантованной. Она может изменяться лишь «скачкообразно», так, чтобы электрон переходил с одного энергетического уровня на другой. Этот вывод является фундаментальным в квантовой механике и не зависит от конкретной формы потенциальной ямы (ловушки), в которой находится электрон или другая микрочастица.

Рассмотрим, как зависит квантование энергии от величины квантового числа $n$. Для этого воспользуемся формулой (26.16') для разности $\Delta E$ и составим отношение $\Delta E / E_п$. Получим

$$\frac{\Delta E}{E_n} = \frac{2n+1}{n^2}. \qquad (26.17)$$

При больших значениях квантового числа $n$ имеем $2n+1 \approx 2n$ и отношение (26.17) дает

$$\frac{\Delta E}{E_n} = \frac{2}{n}. \qquad (26.18)$$

Видно, что при $n >> 1$ отношение $\Delta E/E_n << 1$, или $\Delta E << E_n$. Это означает, что при росте квантового числа *n* разность ближайших энергетических уровней растет медленнее, чем величина энергии каждого из уровней. Другими словами, с ростом *n* должно происходить относительное сближение энергетических уровней. При больших квантовых числах квантование энергии дает результаты, близкие к тем, которые получаются при классическом рассмотрении,— уровни становятся ***квазинепрерывными***. В этом находит свое выражение ***принцип соответствия***, в окончательном виде сформулированный Н. Бором в 1923 г.:

**Принцип соответствия Бора**

***При больших квантовых числах выводы и результаты квантовой механики должны соответствовать классическим результатам, т. е. квантовые результаты переходят в классические.***

В более общей формулировке принцип соответствия утверждает, что между любой физической теорией, которая является обобщением и развитием классической, и первоначальной классической теорией существует связь — в определенных предельных случаях новая теория должна переходить в старую. Так, например, мы видели, что формулы кинематики и динамики специальной теории относительности переходят в формулы классической механики Ньютона при скоростях $v \ll c$ таких, что $(v/c)^2 \ll 1$; выводы волновой оптики переходят в результаты геометрической оптики, если можно пренебречь длиной световой волны по сравнению с любыми расстояниями, встречающимися в данной задаче, и считать, что $\lambda \to 0$. Между квантовой механикой и классической предельный переход связан с возможностью пренебречь конечностью величины $h$ и считать $h = 0$.