Гипотеза де Бройля

Идея об универсальной двойственности корпускулярных и волновых свойств всех объектов природы была впервые высказана Луи де Бройлем (в 1924 году) в качестве гипотезы о волновых свойствах частиц.

Свет обладает, как известно, волновыми и корпускулярными свойствами. В явлениях интерференции, дифракции, поляризации и других свет ведет себя как волна с частотой ν и длиной λ. В фотоэлектрических явлениях, эффекте Комптона и многих других свет ведет себя как частицы (корпускулы), имеющие энергию и импульс

$$E = h\nu = \hbar\omega \qquad p = h/\lambda = \hbar/\lambda\!\!\!^{-},$$

где h — постоянная Планка. Частицы света получили название *фотонов.*

В 1924 г. де Бройль высказал гипотезу, что двойственность волн и корпускул, свойственная свету, должна существовать и у других микрочастиц — у электронов, протонов, атомов и т. д. Микрочастице, обладающей энергией E и импульсом p, должна соответствовать волне с частотой и длиной

$$\nu = E/h \text{ или } \omega = E/\hbar \qquad \lambda = h/p = h/mv \text{ или } \lambda\!\!\!^{-} = \hbar/p = \hbar/mv,$$

где v—скорость движения частиц.

Эти волны называют часто волнами де Бройля, а соотношения соотношениями де Бройля.

Гипотеза де Бройля подвергалась многократной экспериментальной проверке. В качестве примера на рис. показана дифракционная картина, возникающая при пропускании через тонкую металлическую фольгу пучка рентгеновских лучей и пучка электронов.

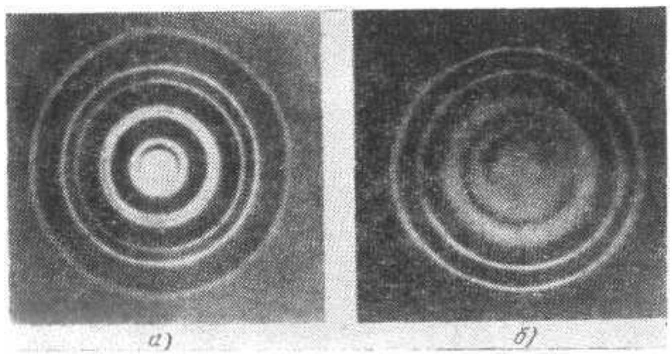


Рис. Дифракционная картина, полученная при прохождении через тонкую металлическую фольгу рентгеновских лучей *(а)* и пучка электронов (б).

Полное сходство этих картин свидетельствует о том, что пучок электронов обладает такими же волновыми свойствами, как и пучок рентгеновских лучей. Вычисление длин электронных волн, произведенное из дифракционных картин, показало хорошее согласие формулы де Бройля с опытом. На волновых свойствах электронов основывается электронная микроскопия.

Интересный опыт был поставлен в 1948 г. Фабрикантом, Биберманом и Сушкиным. Они пропускали через дифракционный прибор настолько слабый пучок электронов, что промежуток времени между двумя последовательными актами пропускания электронов примерно в 30 000 раз превышал время, необходимое для прохождения электронов через прибор. Это давало полную уверенность в том, что на поведение электрона, проходящего через прибор, другие электроны никакого влияния не оказывали. *Опыт показал, что при длительной экспозиции на фотопластинке возникала такая же дифракционная картина, какую дает пучок электронов.*

Это свидетельствует о том, что волновыми свойствами обладает каждый отдельно взятый электрон.

Комптоновская длина волны и длина волны де-Бройля

При взаимодействии свободных электронов с рентгеновским излучением происходит изменение длины волны, обусловленное обменом энергией и импульсом между фотоном и электроном. Это явление называется эффектом Комптона и выражается как

$$\lambda_C = \frac{h}{m_e c} = 2{,}41.10^{-12}\,м = 2{,}41.10^{-3}\,нм$$

где - λ_C – комптоновская длина волны;
m_e – масса электрона;
c – скорость света.

Минимальное расстояние между протоном и электроном в атоме можно охарактеризовать радиусом Бора. Радиус Бора – это радиус основной орбиты электрона в атоме водорода. Он равен $5{,}29.10^{-11}$м, или $5{,}29.10^{-2}$ нм.

Длина волны электрона зависит от свойств реального вещества, т.е.

$$\lambda_D = \frac{h}{m_e V_e}$$

где V_e –скорость движения электрона, зависящая от его энергетического состояния.
λ_D – де-Бройлевская длина волны.

Это уравнение относится к свободному движению частиц. Значение де-Бройлевской длины волны изменяется от 10^{-10}м (0,1нм) для металлов до 10^{-7}м (100нм) для полупроводников. ***Если частица движется в силовом поле, то связанные с ней волны будут описыватся волновой функцией в соответствии с уравнением Шредингера. В этом случае значение длины волны может достигать несколько микрон.***

Обсудим дуализм «волна-частица» на примере электромагнитного излучения.

В случае электромагнитных волн мы имеем следующую закономерность. По мере увеличения длины волны всё легче наблюдать волновые свойства излучения и всё труднее — корпускулярные. И наоборот, чем меньше длина волны, тем ярче выражены корпускулярные свойства излучения и тем труднее наблюдать его волновые свойства. Изменение соотношения корпускулярных и волновых свойств хорошо прослеживается при движении по известной вам шкале электромагнитных волн.

•**Радиоволны**. Длины волн здесь настолько велики, что корпускулярные свойства излучения практически не проявляются. Волновые свойства в этом диапазоне абсолютно доминируют. Длины волн могут составлять несколько метров или даже километров, так что волновая природа проявляется «сама собой» — радиоволны в процессе дифракции запросто огибают дома или горы. Излучение радиоволн и их взаимодействие с материальными объектами отлично описывается в рамках классической электродинамики.

•**Видимый свет и ультрафиолет**,. Это своего рода «переходная область»: в оптике мы можем наблюдать как волновые свойства света, так и корпускулярные.

Однако в обоих случаях надо постараться. Так, длины волн видимого света много меньше размеров окружающих нас тел, поэтому в опытах по интерференции или дифракции света нужно создавать специальные условия (малость щелей или отверстий, удалённость экрана). В свою очередь, термин «красная граница фотоэффекта» также подчёркивает пограничность данного диапазона: фотоэффект начинается лишь при переходе через красную границу.

• **Рентгеновское и гамма-излучение**. Длины волн очень малы, и наблюдать волновые свойства излучения весьма затруднительно. Так, верхняя граница длин волн рентгеновского излучения составляет 10 нм; это лишь на два порядка превышает размер атома. Ясно, что дифракцию на «обычных» препятствиях при такой длине волны наблюдать невозможно.

Рассуждая по аналогии с электромагнитными волнами, можно заключить, что и частица будет проявлять волновые свойства тем лучше, чем больше её длина волны де Бройля (в масштабах данной ситуации).

Так, мы совсем не наблюдаем волновых свойств у окружающих нас тел. (Видели вы, например, интерференцию движущихся автомобилей?) А почему? Давайте посчитаем длину де-бройлевской волны объекта массой 1 кг, движущегося со скоростью 1м/с:

$$\lambda = \frac{6{,}63 \cdot 10^{-34}}{1 \cdot 1} = 6{,}63 \cdot 10^{-34}\,\text{м.}$$

Это на 25 порядков меньше размера атома. Воображение отказывается представить себе столь малую величину. Разумеется, никакого волнового поведения у нашего объекта при таких условиях не обнаруживается — он стопроцентно ведёт себя как «частица», то есть как материальная точка классической механики.

Совсем другое дело — электрон. Масса электрона равна $9{,}1 \cdot 10^{-31}$ кг, и столь малое значение массы (а стало быть, и импульса в формуле $\lambda = h/p$) может дать длину волны де- Бройля, достаточную для экспериментального обнаружения волновых свойств.
И вот оказывается, что электроны с энергией 100 эВ имеют де-бройлевскую длину волны примерно 0, 1 нм — это как раз порядка размера атома и расстояний между атомами в кристаллической решётке! Дифракция электронов на кристаллах была обнаружена! ***Как и ожидалось, полученная дифракционная картина имела тот же характер, что и при дифракции на кристаллической решётке рентгеновских лучей***.
Впоследствии волновые свойства были обнаружены и у более крупных частиц: протонов, нейтронов, атомов и молекул. Гипотеза де Бройля, таким образом, получила надёжное опытное подтверждение.

Соотношение неопределённостей

Обнаружение корпускулярных свойств электромагнитных волн и волновых свойств частиц показало, что объекты микромира подчиняются необычным законам. Эти законы совершенно неожиданны для нас, привыкших наблюдать за макроскопическими телами.

Наше сознание выработало некоторые образы частицы и волны, вполне пригодные для описания объектов классической физики.

Частица — это маленький, локализованный в пространстве сгусток вещества. Волна — это распределённый (не локализованный) в пространстве колебательный процесс. Как же эти понятия могут совмещаться в одном объекте (например, в электроне)?

Так, будучи частицей, электрон локализован в пространстве; но, будучи волной, локализован не в точке, а «размазан» по некоторой области. Координаты и скорость электрона не могут быть измерены одновременно сколь угодно точно. Неопределённость координаты Δx и неопределённость соответствующей проекции импульса Δp_x оказываются связанными соотношением неопределённостей Гейзенберга:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geqslant \hbar.$$

Соотношение неопределённостей имеет фундаментальный характер — оно применимо к любым объектам природы.

Чем точнее мы знаем координаты объекта (то есть чем в меньшей пространственной области он локализован), тем больше получается разброс значений его импульса (то есть тем с большей скоростью объект «готов вылететь» из этой области). И наоборот, чем точнее мы знаем импульс объекта, тем меньше у нас информации о том, где этот объект находится.

Благодаря открытию Гейзенберга тысячи ученых и студентов повторяют один и тот же простой эксперимент, пропуская лазерный луч через сужающуюся щель.
Логично, видимый след от лазера на проекционном экране становится все уже и уже вслед за уменьшением зазора. Но в определенный момент, когда щель становится достаточно узкой, пятно от лазера вдруг начинает становиться шире и шире, растягиваясь по экрану и тускнея пока щель не исчезнет.
Это самое очевидное доказательство квинтэссенции квантовой физики — принципа неопределенности Вернера Гейзенберга. Суть его в том, что чем точнее мы определяем одну из парных характеристик квантовой системы, тем более неопределенней становится вторая характеристика. В данном случае, чем точнее мы определяем сужающейся щелью координаты фотонов лазера, тем неопределеннее становится импульс этих фотонов.

Но коль скоро нет возможности одновременно точно измерить координаты и скорость, то теряет смысл понятие траектории движения объекта.
Механика Ньютона перестаёт работать в микромире и уступает место квантовой механике.

Роль измерений

При измерении координаты частицы с помощью света длины волны $\lambda \sim 1/k$ наилучшая точность измерения координаты (наилучшая разрешающая способность микроскопа) $\delta x \sim 1/k \sim \lambda$.

При этом на частице должен рассеяться, по крайней мере один фотон, который передаст импульс порядка $\delta px \sim \hbar k$. Рассеяние на точечной частице даст сферическую волну,

т. е. фотон может рассеяться в произвольном направлении. Если рассеянный фотон попадет в объектив микроскопа, то, в какую бы сторону он не летел, микроскоп направит его на датчик. *Определить конкретную траекторию фотона в микроскопе принципиально невозможно*. В предельном случае для попадания в объектив микроскопа фотону достаточно отлететь в нужное полупространство. Поскольку направление рассеяния фотона неизвестно, переданный частице импульс не может быть определен, т. е. измерение координаты размывает значение импульса не менее чем на δpx.

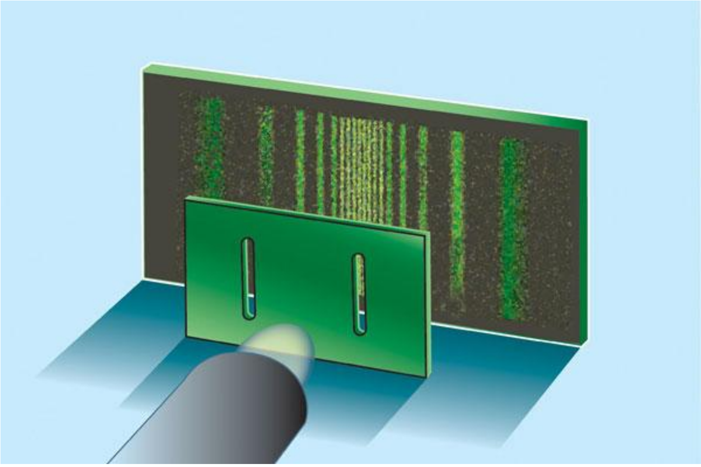
Таким образом, для произведения неточностей получаем:

$\delta x \cdot \delta px \geq c\hbar, \quad c = \mathrm{const} \sim 1.$

Измерение в квантовой механике происходит не только тогда, когда датчик щелкнул, обнаружив частицу, но и тогда, когда датчик не щелкнул (отрицательный результат измерения). Частица при этом беспрепятственно пролетела мимо датчика, но измерение все равно произошло и волновая функция частицы изменилась. Таким образом, мы получаем, что измерение может менять состояние (состояние — другое имя волновой функции) частицы даже если частица, не взаимодействовала с прибором.

Здесь важно, что ***хотя частица не провзаимодействовала с прибором, она потенциально могла это сделать***.

То есть не произошедшие, но потенциально возможные события оказывают влияние на развитие системы.



В 1803 году Томас Юнг направил пучок света на непрозрачную ширму с двумя прорезями. Вместо ожидаемых двух полосок света на проекционном экране он увидел несколько полос, как если бы произошла интерференция (наложение) двух волн света из каждой прорези. В XX и XXI веках было показано, что не только свет, но любая одиночная элементарная частица и даже некоторые молекулы ведут себя как волна, будто проходя через обе щели одновременно. Однако если поставить у щелей датчик, который определяет, что именно происходит с частицей в этом месте и через какую именно щель она все-таки проходит, то на проекционном экране появляются только две полосы, словно факт наблюдения (косвенного влияния) рушит волновую функцию и объект ведет себя как материя.

Благодаря открытию 1927 года тысячи ученых и студентов повторяют один и тот же простой эксперимент, пропуская лазерный луч через сужающуюся щель. Логично, видимый след от лазера на проекционном экране становится все уже и уже вслед за уменьшением зазора. Но в определенный момент, когда щель становится достаточно узкой, пятно от лазера вдруг начинает становиться шире и шире, растягиваясь по экрану и тускнея пока щель не исчезнет. Это самое очевидное доказательство квинтэссенции квантовой физики — принципа неопределенности Вернера Гейзенберга. ***Суть его в том, что чем точнее мы определяем одну из парных характеристик квантовой системы, тем более неопределенней становится вторая характеристика. В данном случае, чем точнее мы определяем сужающейся щелью координаты фотонов лазера, тем неопределеннее становится импульс этих фотонов.***

Мышь. Алиса в стране чудес.

Если квантовая теория верна, то Вселенная, как большая система элементарных частиц, тоже должна описываться волновой функцией. Однако, волновая функция меняется при наблюдении. Так неужели любая мышь, сидящая тихонько где-то в уголке и наблюдающая окружающий мир, меняет Вселенную?! Этот мысленный эксперимент называется ≪Мышь Эйнштейна≫. Этот парадокс разрешается легче всего, причем разными способами, хотя его решения и порождают новые вопросы:

• ***Мы не имеем права писать волновую функцию Вселенной в целом, т. к. у нас для всей Вселенной нет внешнего наблюдателя.***

• ***Наблюдатель в квантовой механике не должен быть составной частью системы***, а значит если мы рассматриваем процесс наблюдения Вселенной Мышью, то волновую функцию следует писать для всей Вселенной, за исключением данной Мыши. Тогда Мышь, наблюдая Вселенную, действительно ее изменяет.

• ***Мышь и Вселенная слишком тесно взаимодействуют***. Таким образом, измерение как бы происходит постоянно. Вместо волновой функции Вселенную с точки зрения Мыши следует описывать матрицей плотности. А матрица плотности уже содержит обычные (классические) вероятности, к которым мы привыкли и в которых парадоксов нет.

• Матрица плотности для Вселенной предполагает усреднение по состояниям Мыши, но Мышь-то знает (хотя бы приблизительно) в каком она состоянии, а значит усреднять по всем состояниям Мыши нельзя, а надо все-таки описывать Вселенную волновой функцией.

• ***Мы не имеем права писать ≪волновую функцию Вселенной≫ (и даже Вселенной за вычетом Мыши),*** т. к. Вселенная — макроскопический объект.

Уравнение Шредингера

Статистическое толкование волн де -Бройля и соотношение неопределенностей Гейзенберга привели к выводу, что уравнением движения в квантовой механике, описывающим движение микрочастиц в различных силовых полях, должно быть уравнение, из которого бы вытекали наблюдаемые на опыте волновые свойства частиц. ***Основное уравнение должно быть уравнением относительно волновой функции Ψ(x, y, z, t), так как именно она, или, точнее, величина $|\Psi|^2$, определяет вероятность пребывания частицы в момент времени t в объеме ΔV, т. е. в области с координатами x и x + dx, y и y + dy, z и z + dz. (Вероятность ведет себя как волна)***

Согласно фольклору, столь распространенному среди физиков, случилось это так: в 1926 году физик-теоретик по имени Эрвин Шрёдингер выступал на научном семинаре в Цюрихском университете. Он рассказывал о странных новых идеях, витающих в воздухе, о том, что объекты микромира часто ведут себя скорее как волны, нежели как частицы. Тут слова попросил пожилой преподаватель и сказал: «Шрёдингер, вы что, не видите, что всё это чушь? Или мы тут все не знаем, что волны — они на то и волны, чтобы описываться волновыми уравнениями?» Шрёдингер воспринял это как личную обиду и задался целью разработать волновое уравнение для описания частиц в рамках квантовой механики — и с блеском справился с этой задачей.

Основное уравнение нерелятивистской квантовой механики сформулировано в 1926 г. Э. Шредингером. Уравнение Шрёдингера, как и все основные уравнения физики (например, уравнения Ньютона в классической механике и уравнения Максвелла для электромагнитного поля), не выводится, а постулируется. Правильность этого уравнения подтверждается согласием с опытом получаемых с его помощью результатов, что, в свою очередь, придает ему характер закона природы. **Общее уравнение Шредингера имеет вид**

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

где $\hbar = h/(2\pi)$, m – масса частицы, Δ – оператор Лапласа, i – мнимая единица,
$U(x, y, z, t)$ – потенциальная функция частицы в силовом поле, в котором она движется,
$\Psi(x, y, z, t)$ – искомая волновая функция частицы.

Подобно тому как обычное уравнение волновой функции описывает распространение, например, ряби по поверхности воды, уравнение Шрёдингера описывает распространение волны ***и вероятности нахождения частицы в заданной точке пространства.*** Пики этой волны (точки максимальной вероятности) показывают, в каком месте пространства скорее всего окажется частица.

Вышеупомянутая волновая функция распределения вероятности, обозначаемая греческой буквой ψ («пси»), является решением приведенного выше дифференциального уравнения (ничего страшного, если оно вам не понятно; главное — примите на веру, что это уравнение свидетельствует о том, ***что вероятность ведёт себя как волна***). Для многих физических явлений, происходящих в микромире, уравнение можно упростить, исключив зависимость Ψ от времени, т.е. найти уравнение Шредингера для стационарных состояний с фиксированными значениями энергии. Это возможно, если силовое поле, в котором частица движется, стационарно, т. е. функция $U = U(x, y, z)$ не зависит явно от времени и имеет смысл потенциальной энергии. В данном случае решение уравнения Шредингера может быть представлено в виде

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}(E-U)\Psi=0$$

где x — расстояние,

h — постоянная Планка,

а m, E и U — соответственно масса, полная энергия и потенциальная энергия частицы.

Картина квантовых событий, которую дает нам уравнение Шрёдингера, заключается в том, что электроны и другие элементарные частицы ведут себя подобно волнам на поверхности океана. С течением времени пик волны (соответствующий месту, в котором скорее всего будет находиться электрон) смещается в пространстве в соответствии с описывающим эту волну уравнением. То есть то, что мы традиционно считали частицей, в квантовом мире ведёт себя во многом подобно волне.

Уравнение Шредингера справедливо для любой частицы (со спином, равным 0), движущейся с малой (по сравнению со скоростью света) скоростью, т. е. со скоростью v«с.

Оно дополняется условиями, накладываемыми на волновую функцию:

1) волновая функция должна быть конечной, однозначной и непрерывной;
2)производные должны быть непрерывны;
3) функция $|\Psi|^2$ должна быть интегрируема (это условие в простейших случаях сводится к условию нормировки вероятностей).

Важным отличием этого волнового уравнения от *классических* уравнений распространения различных волн ***состоит в присутствии мнимых коэффициентов в уравнении Шредингера***. Эти мнимые коэффициенты принципиально неустранимы и в волновой ψ - функции.
Тем самым математически подтверждается тот факт, что волнам де Бройля, сопряженным с частицами, нельзя приписать «физического существования». Поэтому сам де Бройль называл эту волну «фиктивной», а Эйнштейн окрестил её «волной-призраком».
Но вскоре за этими волнами закрепилось другое название: «волны вероятности».

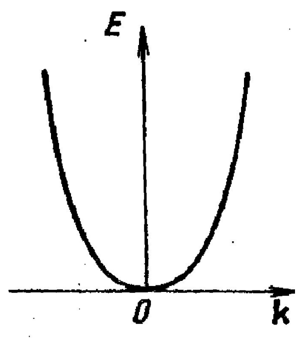
Движение свободной частицы

В общем случае, когда направление движения свободной частице не совпадает ни с одной из осей координат уравнение Шредингера описывающее это движение имеет вид

$$\Delta\psi + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = \Delta\psi + \frac{4\pi^2}{\lambda^2}\psi = \Delta\psi + k^2\psi = 0, \qquad |k| = 2\pi/\lambda$$

K – вектор, совпадающий по направлению с распространением волн де Бройля
Из сравнения первого и третьего выражения находим

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}k^2 = \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2).$$



Таким образом, энергия свободной частицы пропорциональна квадрату волнового вектора. График этой зависимости, представляющий собой квадратную параболу, показан на рис. Так как на *k* никаких ограничений не налагается, то свободная частица может обладать *любой энергией* — ее энергетический спектр является *сплошным.*

Прохождение микрочастиц через потенциальный барьер

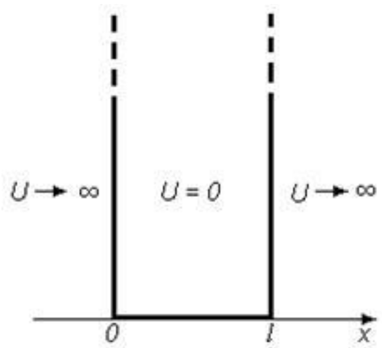
Пусть микрочастица движется вдоль оси x в пространстве, в котором силовое поле меняется скачком. Из условия непрерывности волновой функции ясно, что для барьера конечной толщины *d* вероятность обнаружения частицы на задней стенке барьера равна.

$$w = |\psi_2|^2 = A_2^2 e^{-\frac{2d}{\hbar}\sqrt{2m(U-E)}},$$

т.е отличная от нуля.
Этот факт указывает на возможность прохождения (*просачивания)* микрочастиц сквозь потенциальный барьер конечной толщины *d*
Такое просачивание получило название *туннельного эффекта.*

Замечательным является то, что при туннельном просачивании сквозь потенциальный барьер энергия микрочастицы не меняется.
Они покидают барьер с той же энергией, с какой входят в него.

Частица в одномерной прямоугольной «потенциальной яме» с бесконечно высокими «стенками»



Проведем качественный анализ решений уравнения Шредингера применительно к частице в одномерной прямоугольной «потенциальной яме» с бесконечно высокими «стенками». Такая «яма» описывается потенциальной энергией вида (для простоты принимаем, что частица движется вдоль оси *x)*

$$U(x) = \begin{cases} \infty, x < 0, \\ 0, 0 \le x \le l, \\ \infty, x > l, \end{cases}$$

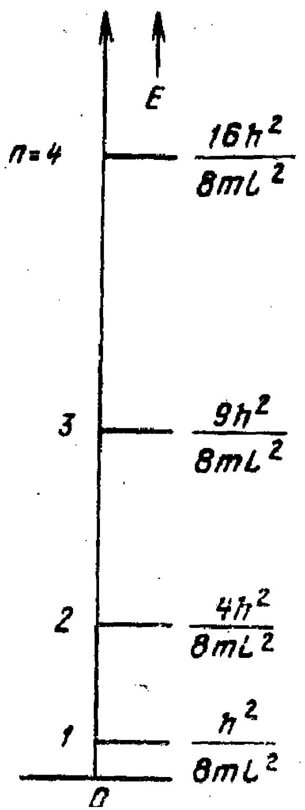
где l — ширина «ямы», а энергия отсчитывается от ее дна

По условию задачи (бесконечно высокие «стенки»), частица не проникает за пределы «ямы», поэтому вероятность ее обнаружения (а следовательно, и волновая функция) за пределами «ямы» равна нулю. На границах «ямы» (при x=0 и $x = 1)$ непрерывная волновая функция также должна обращаться в нуль. Следовательно, граничные условия в данном случае имеют вид
$\Psi(0) = \Psi(l) = 0$. В пределах «ямы» ($0 \le x \le 0$) уравнение Шредингера сведется к уравнению

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\Psi = 0 \qquad \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + k^2\Psi = 0$$

где $k^2 = 2mE / \hbar^2$.

Энергия состояния для микрочастицы движущейся в ограниченной области пространства



Решение уравнений Шредингера позволяет найти энергию состояния, для микрочастицы движущейся в ограниченной области пространства описываемая волновой функцией

$$E_n = n^2 \frac{h^2}{8mL^2}.$$

Таким образом, микрочастица, заключенная в потенциальную яму, обладает *дискретным рядом собственных значений энергии* E_n;
целое число n, определяющее эти значения E, называется ***квантовым числом***.

Как следует из выражения, дискретный характер энергетического спектра микрочастицы будет проявляться тем сильнее, чем меньше область пространства L, в которой локализована эта частица. При L, значительно превосходящей атомные размеры, расстояние между энергетическими уровнями оказывается настолько незначительным, что во многих случаях можно считать E *непрерывной* функцией от k.

(n = 1, 2, 3,…), т. е. стационарное уравнение Шредингера, описывающее движение частицы в «потенциальной яме» с бесконечно высокими «стенками», удовлетворяется только при собственных значениях E_n, зависящих от целого числа n. Следовательно, энергия E_n частицы в «потенциальной яме» с бесконечно высокими «стенками» принимает лишь **определенные дискретные значения, т. е. квантуется.**

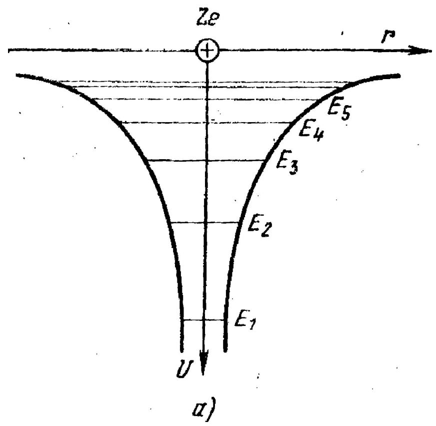
Энергетический интервал между уровнями

Квантованные значения энергии E_n называются **уровнями энергии,** а число *n,* определяющее энергетические уровни частицы, называется **главным квантовым числом.** Таким образом, микрочастица в «потенциальной яме» с бесконечно высокими «стенками» может находиться только на определенном энергетическом уровне E_n, или, как говорят, частица находится в квантовом состоянии *n.* Из выражения вытекает, что энергетический интервал между двумя соседними уровнями равен

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2}(2n+1) \approx \frac{\pi^2 \hbar^2}{ml^2} n$$

Например, для электрона при размерах ямы $l = 10^{-1}$ м (свободные электроны в металле), $\Delta E_n \approx 10^{-35} \cdot n$ Дж $\approx 10^{-16}\, n$ эВ, т.е. энергетические уровни расположены столь тесно, что спектр практически можно считать непрерывным.
Если же размеры ямы соизмеримы с атомными ($l \approx 10^{-10}$ м), то для электрона
$\Delta E_n \approx 10^{-17} n$ Дж $\approx 10^2 n$ эВ,
т.е. получаются явно дискретные значения энергии (линейчатый спектр).

Таким образом, применение уравнения Шредингера к частице в «потенциальной яме» с бесконечно высокими «стенками» приводит к квантованным значениям энергии, в то время как классическая механика на энергию этой частицы никаких ограничений не накладывает.



Зависимость энергии взаимодействия электрона с ядром атома

Водородоподобный атом

В водородоподобном атоме вокруг ядра с зарядом ***Z*** (порядковый номер химического элемента) движется единственный электрон. Потенциальная энергия взаимодействия его с ядром равна:

$$U(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}.$$

Из рисунка видно, что водородоподобный атом можно рассматривать как своеобразную потенциальную яму, ограниченную потенциальной кривой. Электрон в этой яме обладает отрицательной энергией. Подставляя в основное уравнение Шредингера выражение для потенциальной энергии ***U*** получим

$$E_n = -\frac{Z^2 m e^4}{8\varepsilon_0^2 h^2}\frac{1}{n^2},$$

Откуда видно, что электрон в водородоподобном атоме обладает дискретным энергетическим спектром.

Кроме этого, состояние электрона в водородоподобном атоме в сферических координатах определяется тремя квантовыми числами— *главным n,* характеризующим энергию E_n; *орбитальным I,* определяющим орбитальный момент количества движения электрона *pi,* и *магнитным* m_l, характеризующим ориентацию *pi* относительно избранного направления. Эти состояния описываются собственными волновыми функциями ψ являющимися решением уравнения Шредингера .