ЭЛЕМЕНТЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

План лекции

I. Волновая функция.
II. Уравнение Шрёдингера.
III. Частица в одномерной потенциальной яме бесконечной глубины.
IV. Туннельный эффект.

Основные понятия

1. **Масса микрочастицы** - m: определяет её корпускулярные свойства.

2. **Потенциальная энергия** $U(x, y, z, t)$: определяет взаимодействие частицы с силовым полем.

3. **«Пси»-функция** $\Psi\ (x, y, z, t)$: определяет волновые свойства микрочастицы.

- является также функцией координат и времени.

Волновая функция

Состояние микрочастицы в квантовой механике описывается заданием волновой функции, являющейся функцией пространственных координат и време

$$\psi(x, y, z, t)$$

$$dP = \left|\Psi(x,y,z)\right|^2 dV\,,$$

$$P = \int_V \left|\Psi(x,y,z)\right|^2 dV$$

$$\rho = \frac{dP}{dV} = \left|\Psi\right|^2$$

$$\int_V \left|\Psi\right|^2 dV = 1$$

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

- Квантовая механика **не позволяет определить** **точное местоположение** частицы в пространстве или траекторию частицы.
- С помощью волновой функции можно лишь **предсказать**, с какой вероятностью частица может быть обнаружена в различных точках пространства.
- Движение по определенной траектории **несовместимо** с волновыми свойствами.

Свойства волновой функции

Правильную интерпретацию физического смысла волновой функции дал М. Борн в 1926 г.

1. **Физический смысл** имеет не сама волновая функция, а квадрат ее модуля: **квадрат модуля волновой функции равен плотности вероятности нахождения частицы в соответствующем объёме пространства.**

$$|\Psi|^2 = \frac{dP}{dV}$$

2. **Вероятность P** нахождения микрочастицы в заданном объёме V **равна единице:**

$$P = \int_{-\infty}^{\infty} dP = 1$$

3. **Условие нормировки волновой функции:**

$$\int_V |\Psi|^2 dV = 1$$

4. **Волновая функция** должна быть:

- **непрерывной,** поскольку описывает последовательное изменение поведения микрочастицы в некотором заданном пространстве;
- **однозначной и конечной,** т.е. давать один ответ на поставленный вопрос о месте нахождения микрочастицы;
- **интегрируемой и дифференцируемой** по координатам и времени.

Принцип суперпозиции

Волновая функция удовлетворяет принципу суперпозиции: ***если система может находиться в различных состояниях, описываемых волновыми функциями Ψ_1, Ψ_2, … Ψ_n, то она может находиться в состоянии, описываемом линейной комбинацией этих функций***

$$\Psi = \sum_n C_n \Psi_n$$

где C_n (n = 1, 2, 3…) – произвольные, комплексные числа.

Эрвин ШРЁДИНГЕР (Schrodinger)

Австрийский физик

родился в Вене

(1887 г. - 1961 г.)

Уравнение Шредингера

- основное уравнение квантовой механики;
- описывает поведение микрочастицы в силовом поле;
- сочетает в себе как волновые, так и корпускулярные свойства микрочастиц;
- является законом природы;
- его нельзя строго вывести из каких-либо известных ранее соотношений (как и уравнения Ньютона в классической механике).

- **Уравнение Шредингера** позволяет найти ответ на следующие вопросы.

1. Каков энергетический спектр микрочастицы: (дискретный или непрерывный)

$$E_1, E_2, \ldots, E_n$$

2. Каков вид волновых функций?

$$\Psi_1, \Psi_2, \ldots, \Psi_n$$

3. В какой точке силового поля локализована микрочастица?

$$|\psi_1|^2, |\psi_2|^2, \ldots, |\psi_n|^2$$

Нестационарными называются состояния микрочастицы, в которых потенциальная энергия зависит и от координат и от времени:

$$U = U(x, y, z, t)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + U\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

$$\Delta\Psi = \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}$$

Одномерное временное уравнение Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + U \cdot \psi$$

Уравнение Шредингера дополняется условиями, которые накладываются на ψ - функцию:

- функция ψ должна быть *конечной*, *однозначной* и *непрерывной*;
- производные $\frac{\partial\psi}{\partial x}, \frac{\partial\psi}{\partial y}, \frac{\partial\psi}{\partial z}$ должны быть *непрерывны*;
- функция должна быть *интегрируема*, т.е. интеграл

$\iiint\limits_{-\infty} |\psi|^2 dV$ должен быть конечным. Это условие сводится к **условию нормировки вероятностей**.

$$\boxed{\Psi(x,y,z,t)=\Psi(x,y,z)\cdot e^{-\frac{i}{\hbar}Et}}$$

Стационарными называются состояния микрочастицы, в которых её потенциальная энергия не зависит от времени и является функцией только координат:

$$U = U(x, y, z)$$

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

Стационарное уравнение Шредингера

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

Одномерное уравнение Шредингера для стационарных состояний

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\psi = 0$$

- где E – полная энергия частицы.

Собственные функции и собственные значения энергии

- Функции , удовлетворяющие уравнению Шредингера при заданном виде
- ***U = U (x, y, z),*** называются ***собственными функциями***. Они существуют лишь при определенных значениях ***E,*** называемых ***собственными значениями энергии***.
- Совокупность собственных значений энергии образует ***энергетический спектр частицы.***

Движение свободной частицы

Свободная частица движется вдоль оси X в свободном пространстве при отсутствии внешних силовых полей.

В этих условиях **потенциальная энергия частицы равна нулю** (U = 0).

Тогда **полная энергия частицы равна её кинетической энергии:**

$$E = \frac{p^2}{2m}$$

Уравнение Шредингера в одномерном случае движения имеет вид:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi = 0$$

Это уравнение похоже на дифференциальное уравнение гармонических колебаний,

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \omega^2 x = 0$$

решением которого является выражение:

$$x = x_O \cdot \sin(\omega t + \alpha)$$

По аналогии обозначим величину

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = \omega^2$$

Тогда решением уравнения Шредингера является выражение:

$$\psi(x) = \psi_o \sin(\omega t + \alpha)$$

Эта функция представляет собой **плоскую монохроматическую волну де Бройля.**

Область локализации частицы определяет квадрат модуля волновой функции.

$$|\psi|^2 = \psi_o^{\ 2}\ \sin^2(\omega x + \alpha)$$

Поскольку $\left\langle \sin^2 x = \frac{1}{2} \right\rangle$, то $|\psi|^2 = \dfrac{\psi_o^{\ 2}}{2}$.

Получили, что все **положения частицы в пространстве (вдоль оси X) равновероятны.**

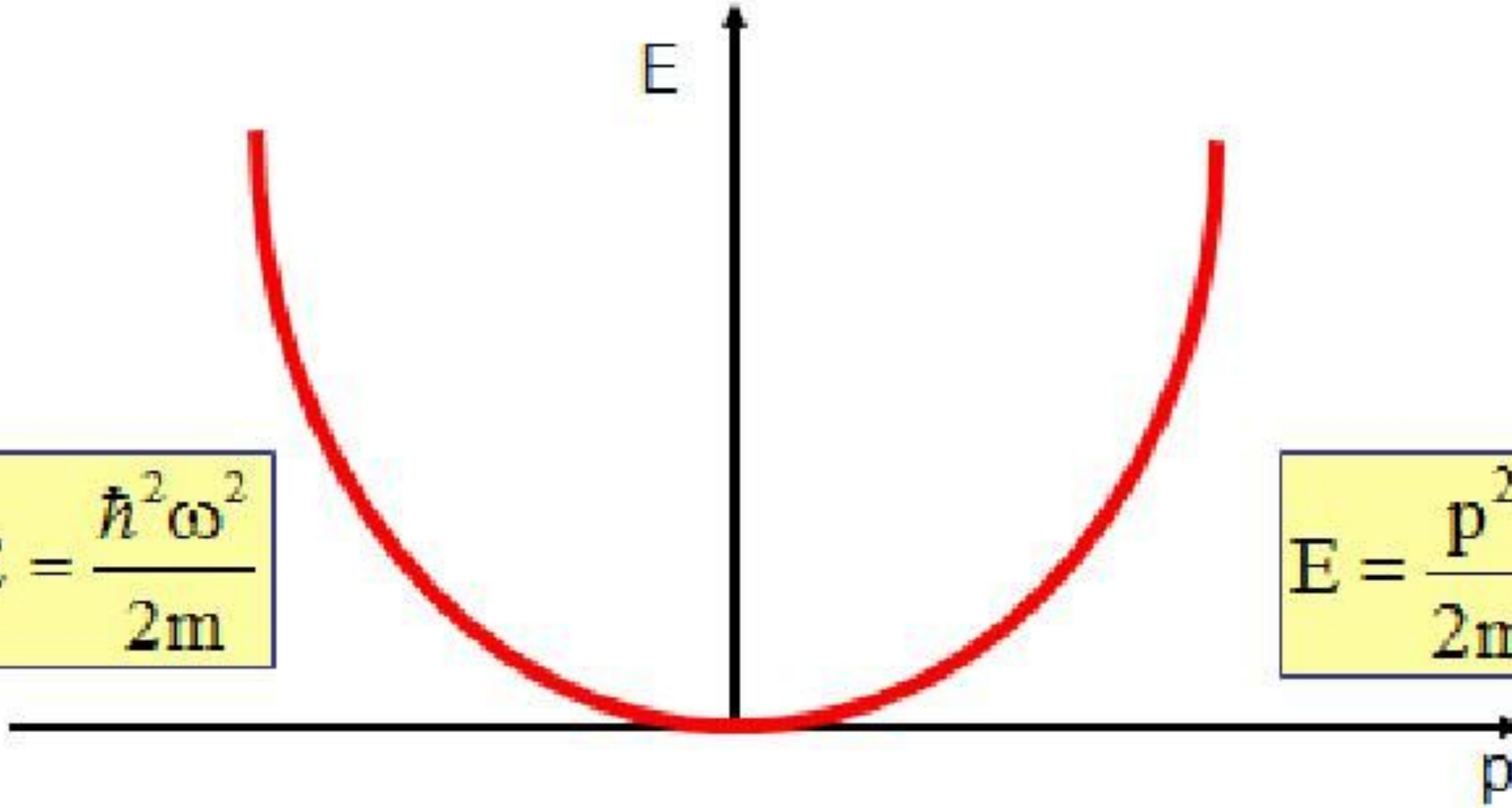
Определим **значения полной энергии** и **импульса** частицы:

$$E = \frac{\hbar^2\omega^2}{2m}$$

$$p = \hbar\omega$$

Энергетический спектр свободной частицы является **непрерывным.**

Зависимость полной энергии от импульса
(равнозначно от частоты)



$$E = \frac{\hbar^2\omega^2}{2m}$$

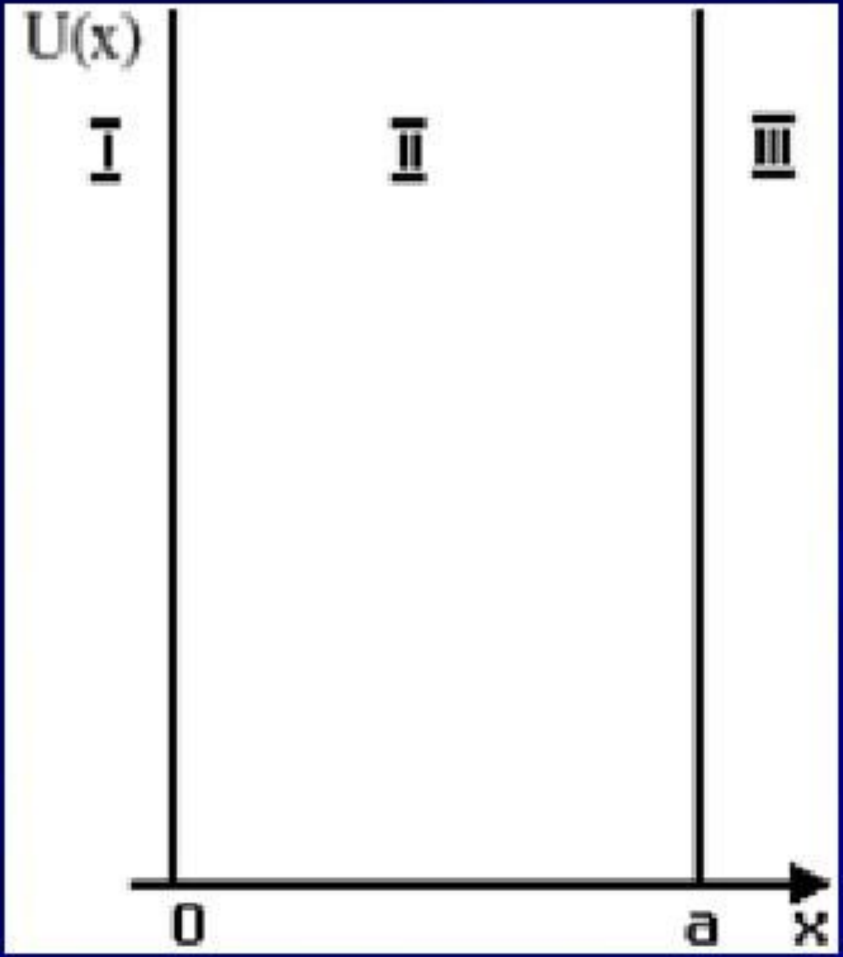
$$E = \frac{p^2}{2m}$$

Непрерывный энергетический спектр

Частица в одномерной потенциальной яме бесконечной глубины

- **Потенциальной ямой** называется ограниченная область пространства, в которой потенциальная энергия ***U*** частицы меньше некоторого значения ***Umax***.
- В частности, при $U_{\max} = \infty$ на обоих концах некоторого промежутка на оси X имеет место **одномерная потенциальная яма.**

Одномерная потенциальная яма



Потенциальная энергия частицы **U(x)** имеет вид

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

Частица в одномерной потенциальной яме бесконечной глубины

- Если потенциальная энергия частицы вне и внутри потенциальной ямы имеют следующие значения

$U = 0$ при $0 \le x \le a$

$U = \infty$ при $x \le 0$ и $x \ge a$,

то яма имеет «**плоское дно**».

Одномерное уравнение Шредингера для частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме

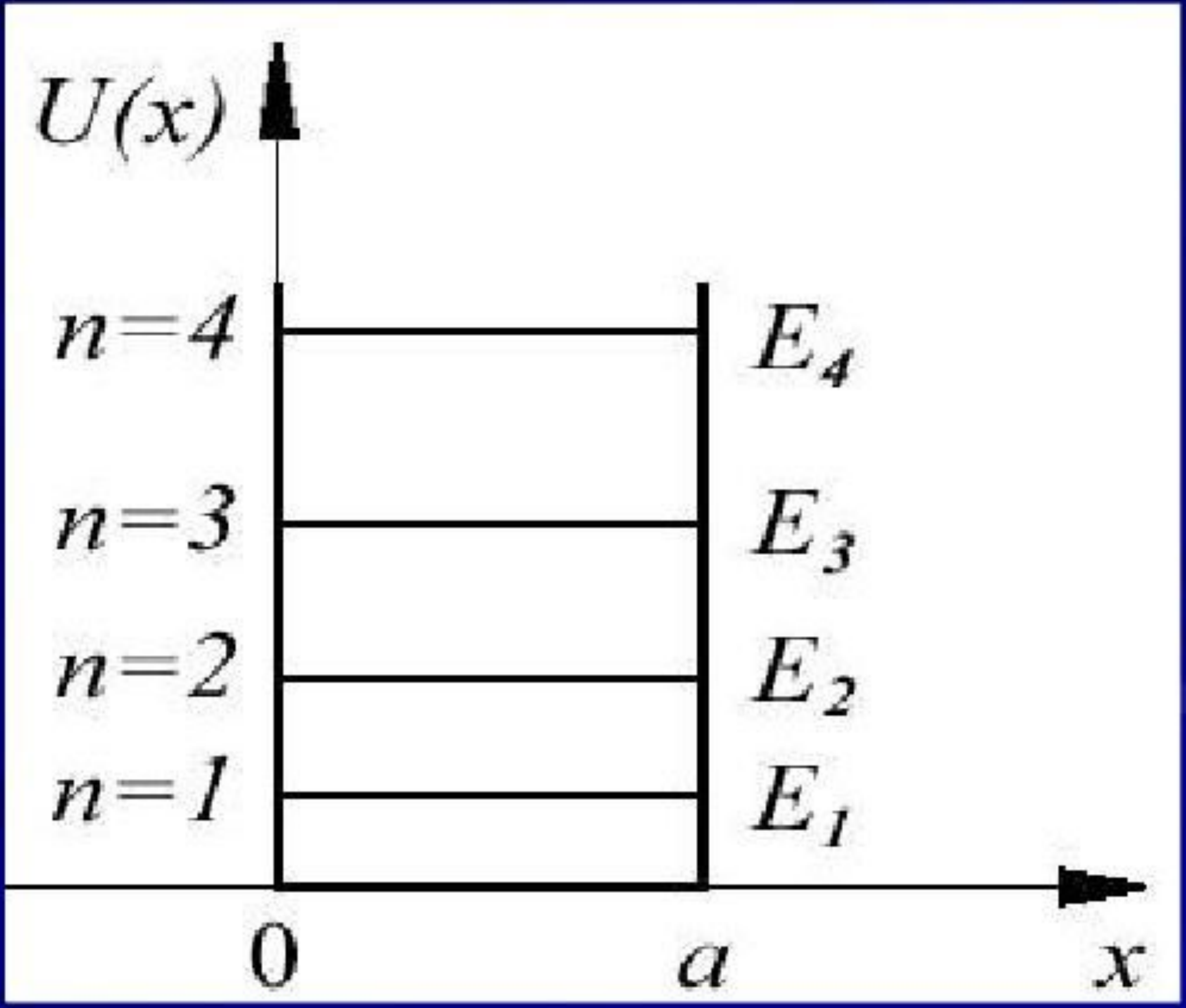
$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\psi = 0$$

Собственное значение энергии En частицы, находящейся на n-м энергетическом уровне в бесконечно глубокой одномерно прямоугольной «потенциальной яме»

$$E_n = \frac{\pi^2 \cdot \hbar^2}{2m \cdot a^2} n^2 \qquad (n = 1,2,3,...)$$

где a - ширина потенциальной ямы; m – масса частицы.

Частица, находящаяся в потенциальной яме, может иметь только дискретные, квантованные, значения энергии



Особенности энергетического спектра

1. **Полная энергия** частицы **положительная** ($E > 0$).

2. **Полная энергия квантуется**: принимает дискретный набор значений, причём $\boxed{E_n = n^2 E_1}$

Энергия первого (**основного**) состояния: $\boxed{E_1 = \dfrac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}}$

3. **Энергетический спектр** является **расходящимся**, поскольку расстояния между уровнями увеличиваются.

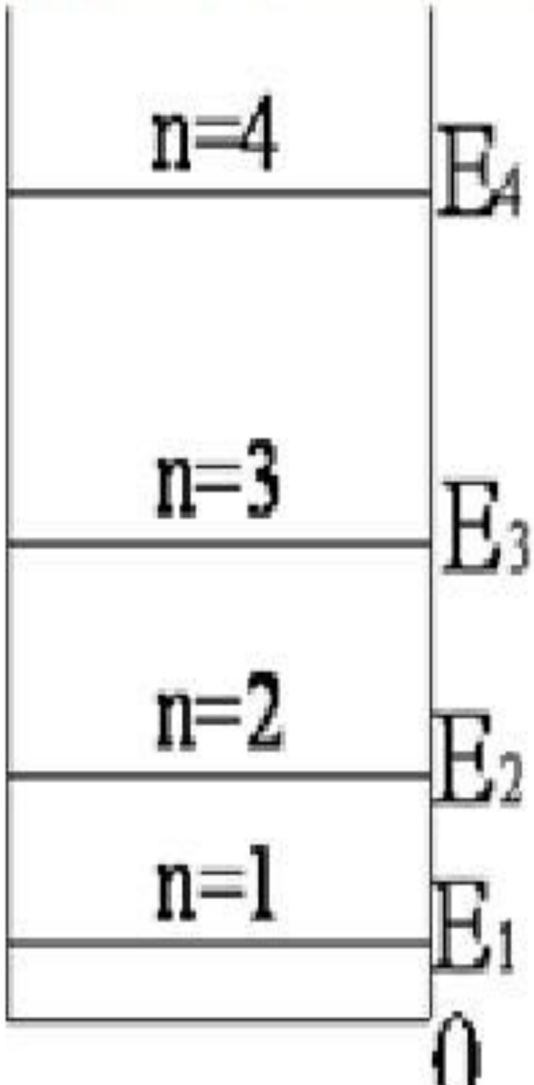
Особенности энергетического спектра

1. **Полная энергия** частицы **положительная** ($E > 0$).
2. **Полная энергия квантуется:** $E_n = n^2 E_1$ принимает дискретный набор значений, причём

Энергия первого (**основного**) состояния: $E_1 = \dfrac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$

3. **Энергетический спектр** является **расходящимся**, поскольку расстояния между уровнями увеличиваются.

Разность энергий двух соседних уровней **пропорциональна числу n:**



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

При $n \gg 1$

$$\Delta E_n \approx \frac{\pi^2 \hbar^2}{ma^2} n$$

Произведем оценку расстояний между соседними уровнями для различных значений массы частицы **m** и ширины ямы **a**.

Пример 1. Рассмотрим молекулу ($m \sim 10^{-26}$ кг) в сосуде ($L \sim 0{,}1$м):

$$\Delta E_n \approx \frac{3{,}14^2 \cdot (1{,}05 \cdot 10^{-34})^2}{10^{-26} \cdot 0{,}1^2} n \approx 10^{-39} n \text{ Дж} \approx 10^{-20} n \text{ эВ.}$$

Столь густо расположенные энергетические уровни будут практически восприниматься как **сплошной спектр энергии.**

Квантование энергии в этом случае в принципе имеет место, но на характере движения молекул это не сказывается.

Пример 2. Свободные электроны ($m \sim 10^{-30}$кг) в металле ($L \sim 0{,}1$м).

$$\Delta E_n \sim n \cdot 10^{-35}\,\text{Дж} = n \cdot 10^{-16}\,\text{эВ}$$

В этом случае **квантованием энергии также можно пренебречь.**

Пример 3. Электрон в атоме (L = 0,1 нм).

$$\Delta E_n \approx \frac{3{,}14^2 \cdot (1{,}05 \cdot 10^{-34})^2}{10^{-30} \cdot (10^{-10})^2} n \approx 10^{-17}\,\text{Дж} = n \cdot 10^2\,\text{эВ}$$

Дискретность энергетических уровней будет проявляться весьма заметно.

Перейдём к рассмотрению **собственных значений волновых функций:**

$$\psi_n = \psi_O \sin \omega x$$

, где

$$\omega = \frac{n\pi}{L}$$

Тогда

$$\Psi(x) = \Psi_O \cdot \sin \frac{n\pi x}{a}$$

Для нахождения **амплитуды волновой функции** ψ_O воспользуемся **условием нормировки**, в котором пределы интегрирования будут от 0 до а (частица существует только внутри ямы).

$$\int_0^a \psi^2 dx = 1 \quad \Longrightarrow \quad \psi_O{}^2 \int_0^a \sin^2 \frac{n\pi x}{a} dx = 1$$

$$\psi_O{}^2 \cdot \frac{a}{2} = 1$$

Амплитуда волновой функции $\psi_O = \sqrt{\dfrac{2}{a}}$.

Окончательно **волновые функции** запишутся как

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}$$

n = 1, 2. 3,…

Поскольку для энергии микрочастицы имеем следующие выражения:

$$E = \frac{p^2}{2m}$$

$$E = \frac{\omega^2 \hbar^2}{2m}$$

то **импульс** частицы будет равен: $p = \hbar\omega$.

С учётом $\omega = \frac{n\pi}{a}$ получим выражение для **длины волны де Бройля**:

$$\lambda_Б = \frac{h}{p} = \frac{2a}{n}$$

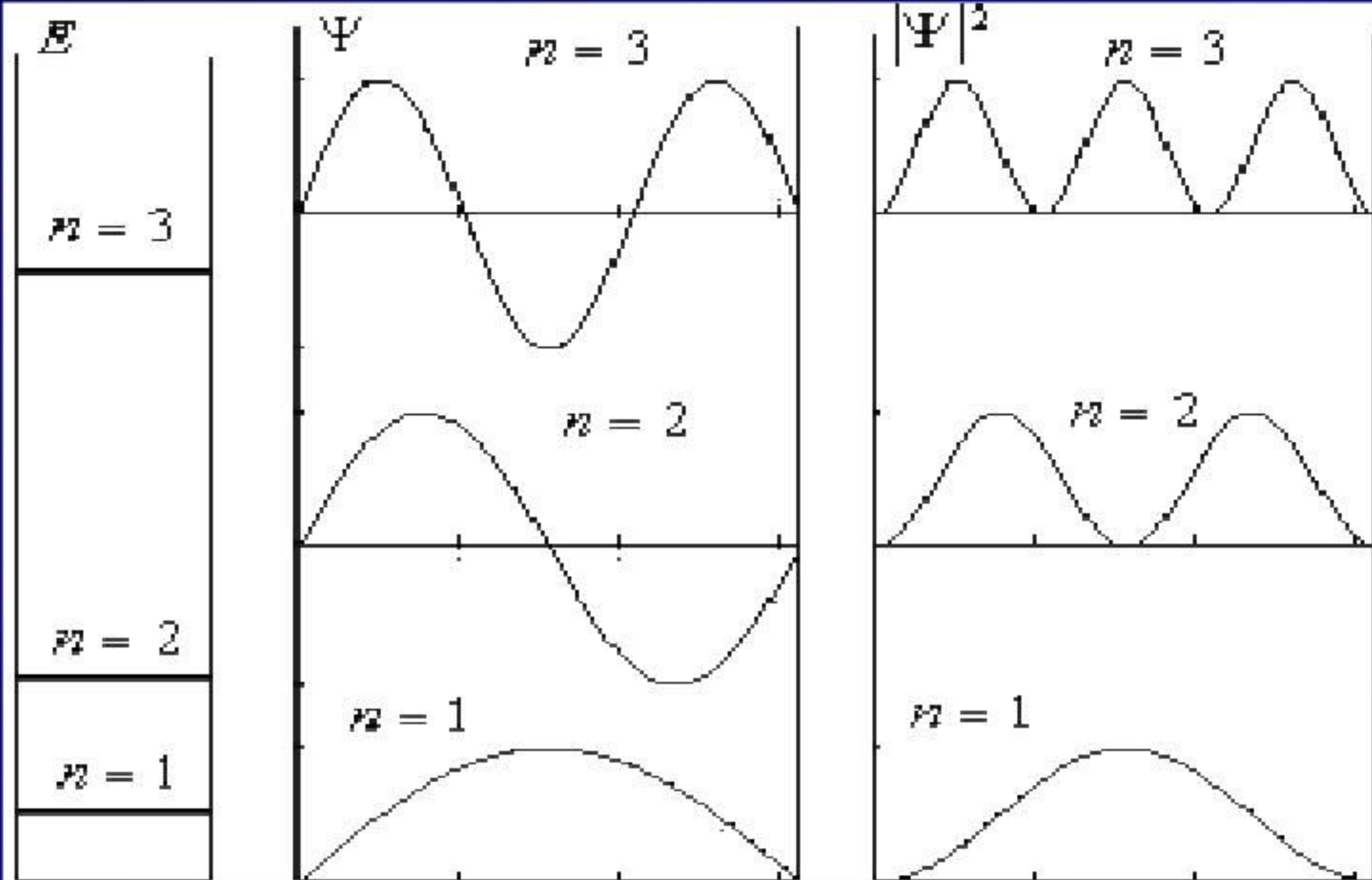
Область локализации частицы в потенциальной яме определяется через квадрат модуля волновой функции:

$$|\psi_n|^2 = \frac{2}{a}\sin^2\frac{n\pi x}{a}$$

Частица вероятнее всего находится в той точке ямы, для которой наблюдается наибольшее значение **вероятности**, определяемое как

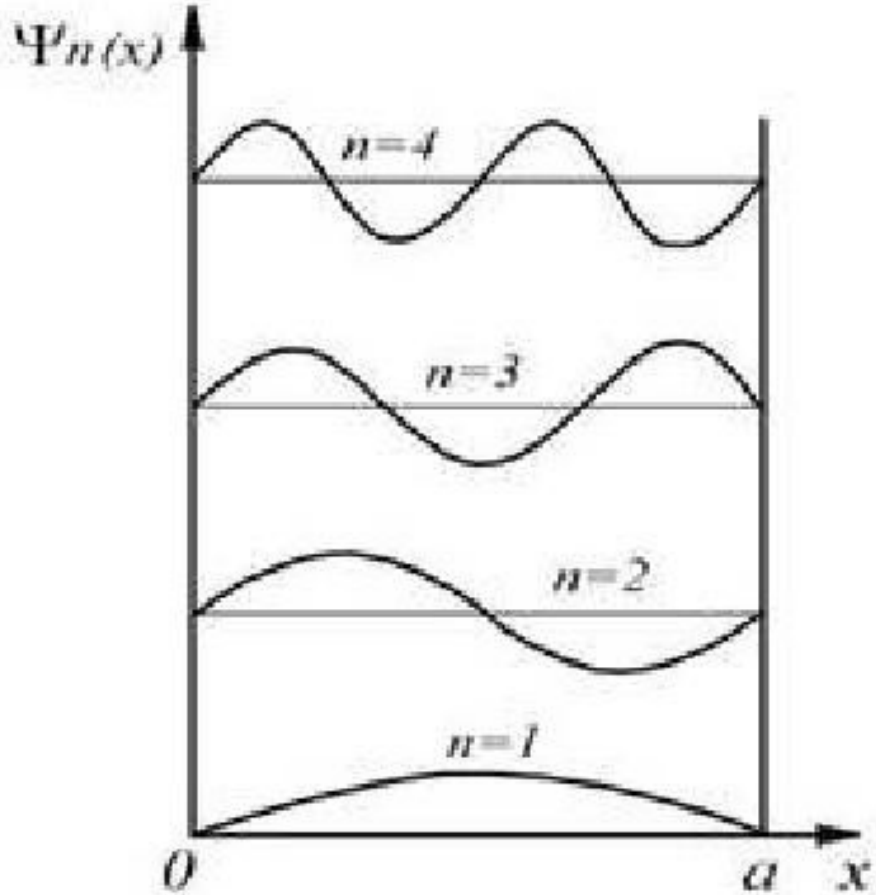
$$P = \int_0^x \frac{2}{a}\sin^2\frac{n\pi x}{a}$$

Уровни энергии, волновых функций распределения плотности вероятности по координате X

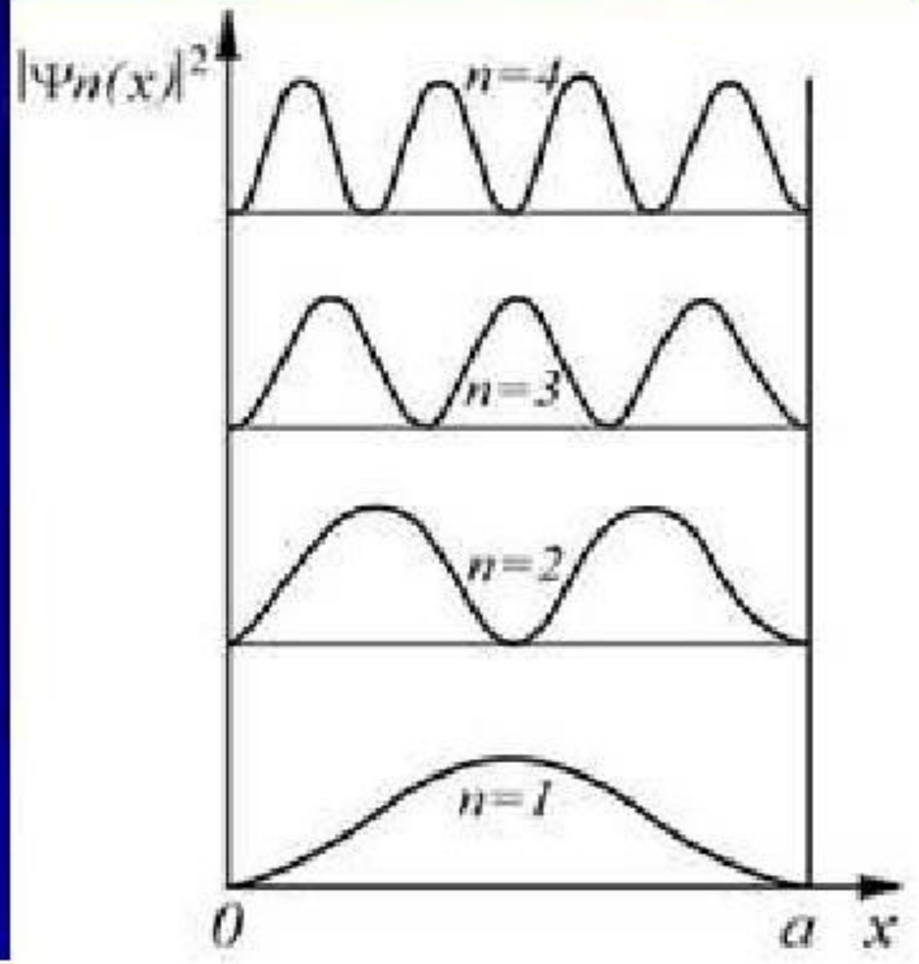


ГРАФИКИ

- волновых функций для первых четырех значений квантового числа ***n***



- плотности вероятности нахождения частицы в яме



Если необходимо найти вероятность обнаружения частицы в некоторой области ямы между точками с координатами x_1 и x_2, то согласно смыслу волновой функции необходимо вычислить интеграл вида:

$$P = \int_{x_1}^{x_2} |\psi(x)|^2 \, dx$$

При этом искомая вероятность P на рисунке будет изображаться заштрихованной площадью между точками x_1 и x_2.

Выводы:

1. При **n = 1** (**основное состояние**). Микрочастица

- имеет **энергию** E_1;

$$\boxed{E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}}$$

- имеет **длину волны де Бройля**

$$\boxed{\lambda_Б = \frac{2a}{n} = 2a}$$

- на ширине ямы укладывается **половина длины волны де Бройля** частицы;

- вероятнее всего будет находиться **в середине ямы** с координатой x = a/2.

2. При **n = 2** (**первое возбуждённое состояние**).

Микрочастица

- имеет **энергию** E_2 $\boxed{E_2 = 4E_1}$;
- имеет **длину волны де Бройля** $\boxed{\lambda_Б = \dfrac{2a}{n} = a}$
- на ширине ямы укладывается **целая длина волны де Бройля;**
- частица с одинаковой вероятностью может находиться **в двух точках потенциальной ямы** с координатами **x_1 = a/4** и **x_2 = 3a/4.**

3. Если **частицу возбудить до высоких энергий** ($n \to \infty$), то она может находиться в любой точке ямы.

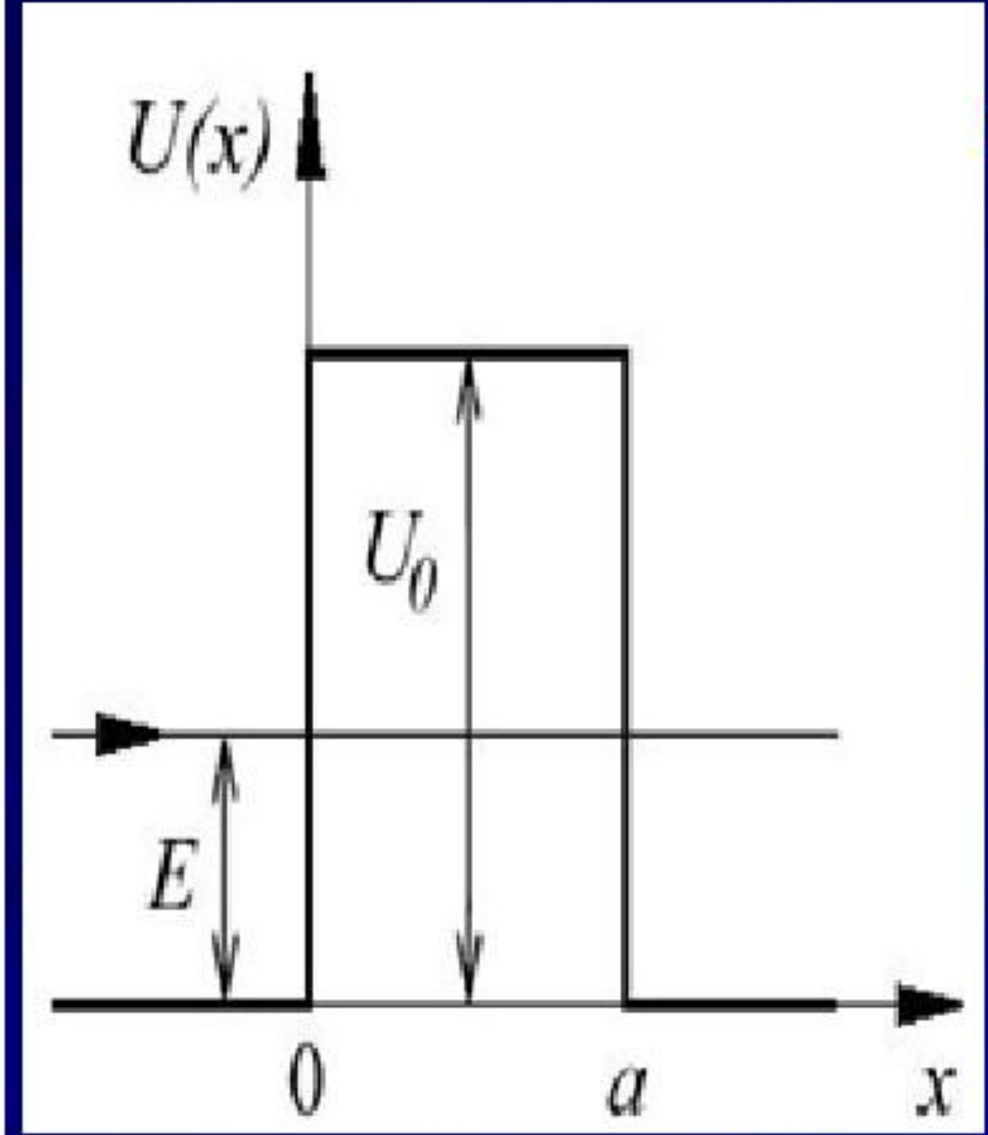
В этих условиях **частица может покинуть пределы ямы** и перейти в **область потенциального барьера**.

Вероятность обнаружения частицы за пределами потенциальной ямы оказывается хотя и очень малой, но отличной от нуля.

Это совершенно невозможно с точки зрения классической теории.

В квантовой же механике подобные явления возможны благодаря так называемому **туннельному эффекту.**

Прохождение частицы через потенциальный барьер.



- Область пространства, в которой потенциальная энергия частицы больше, чем в окружающих областях называется потенциальным барьером

$$U(x)=\begin{cases}0, x<0\\ U_0, 0<x<a\\ 0, x>a\end{cases}$$

Поведение частицы с классической точки зрения

- Если **E > U_0** , то частица проходит над барьером $0 \le x \le a$ лишь уменьшается скорость частицы.
- Затем при $x > a$ снова принимает первоначальное значение.

- Если **E < U_0** , то частица отражается от барьера и летит в обратную сторону. Сквозь барьер частица проникнуть не может

Поведение частицы с квантовой точки зрения

- Если **$E > U_0$**, то существует отличная от нуля вероятность того, что частица отразится от барьера и полетит в обратную сторону.

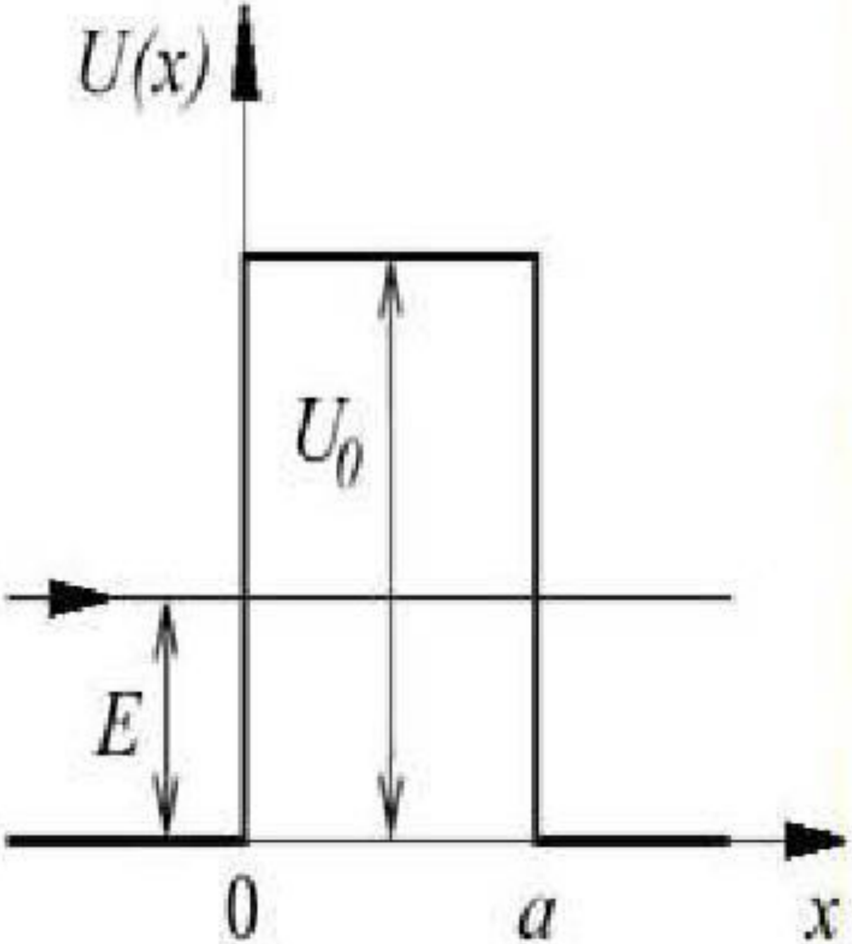
- Если **$E < U_0$**, то имеется отличная от нуля вероятность того, что частица проникнет «сквозь» барьер и окажется в области $x > a$

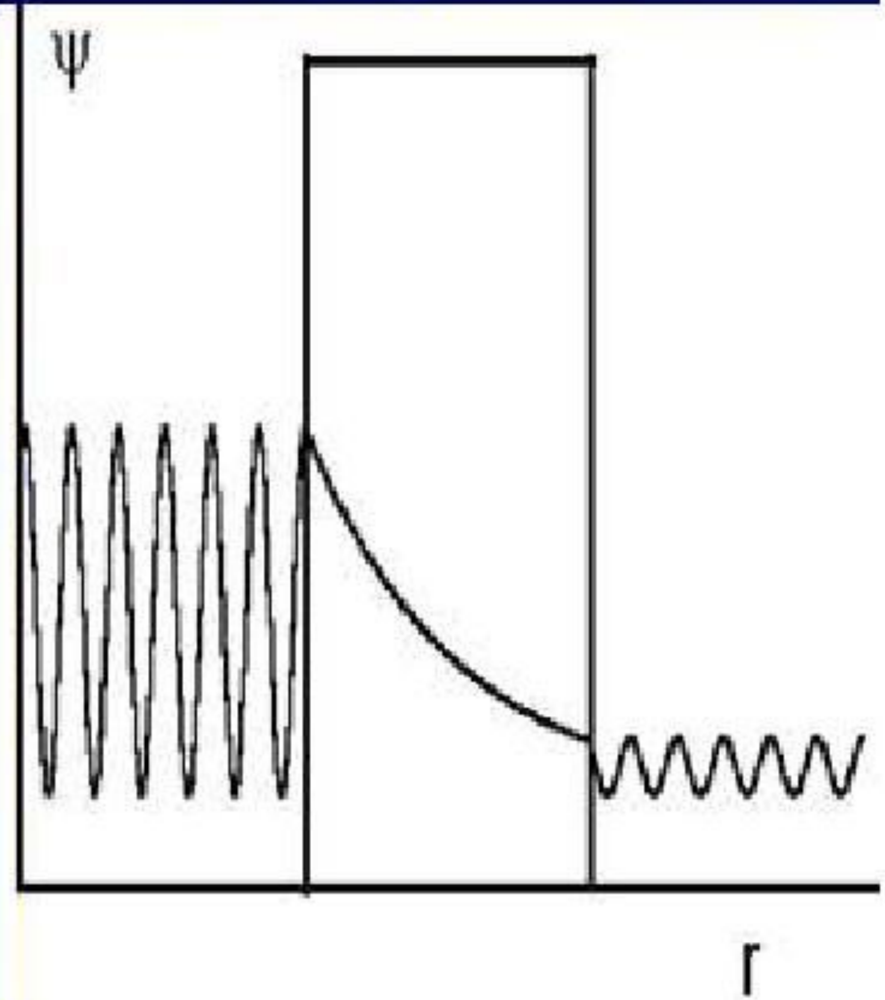
- Вывод: т.о., квантовая механика приводит к новому квантовому явлению – туннельному эффекту

Туннельный эффект

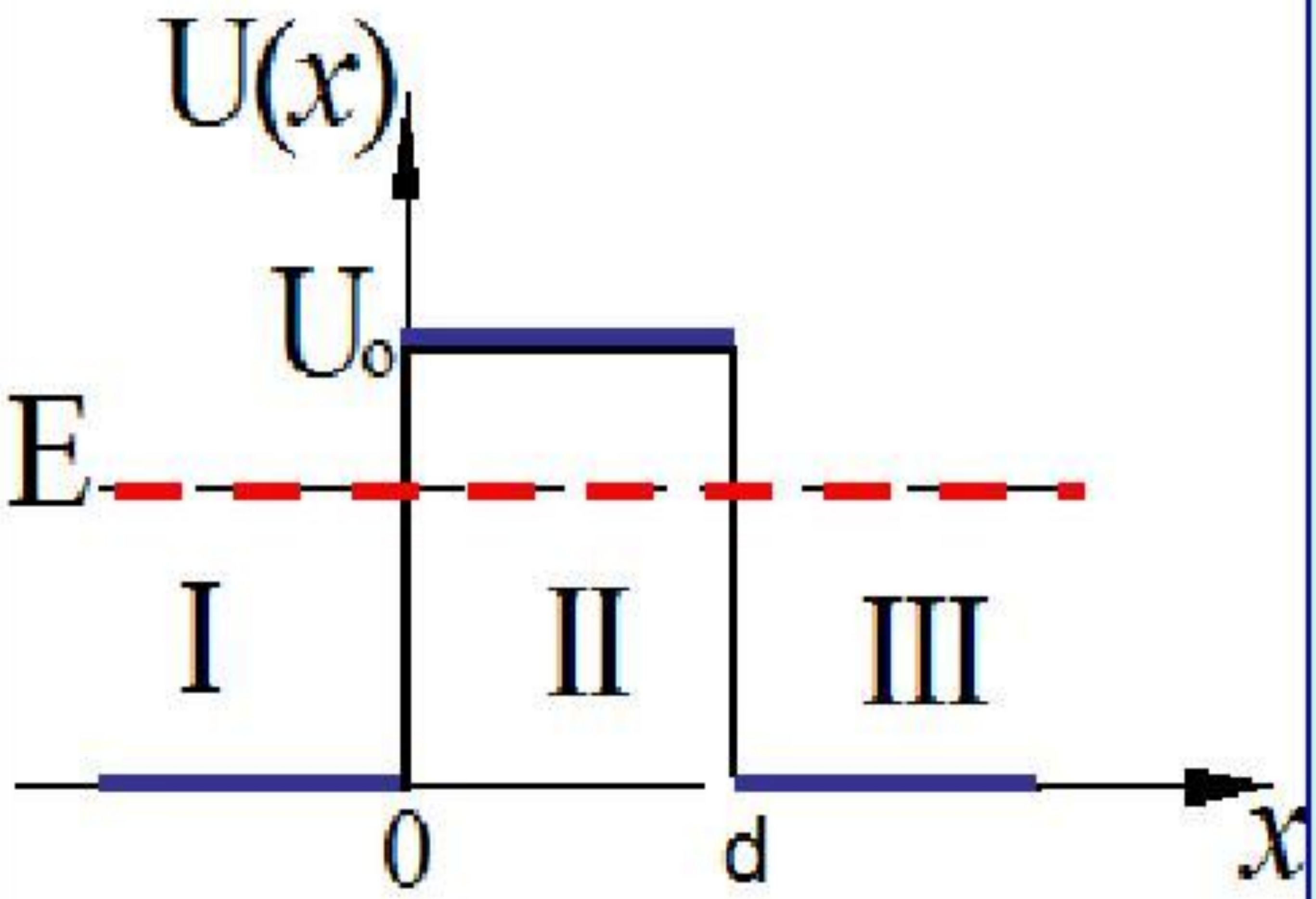
- Туннельным эффектом называется прохождение «просачивание» частиц сквозь потенциальный барьер.
- Туннельный эффект – чисто квантовый эффект, связанный с тем, что частицы обладают волновыми свойствами.

Прохождение частицы через потенциальный барьер





Одномерный потенциальный барьер с прямоугольными стенками



Рассмотрим задачу для случая, когда полная энергия микрочастицы меньше высоты потенциального барьера:

$$E < U_0$$

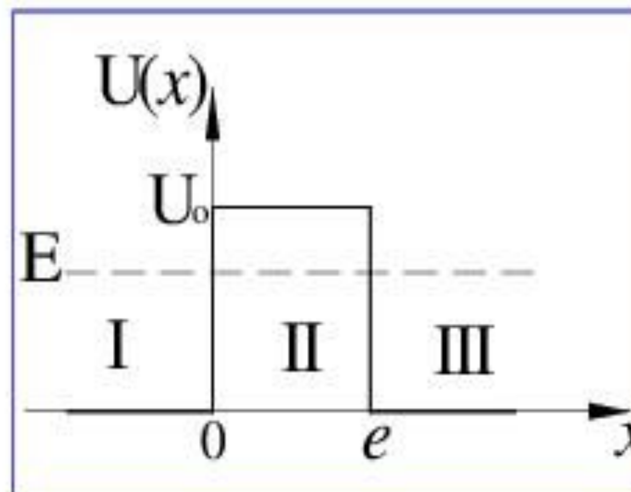
В этом случае уравнение Шредингера имеет вид:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\psi = 0$$

для областей I и III

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - U_0\right)\psi = 0$$

для области II,



причем

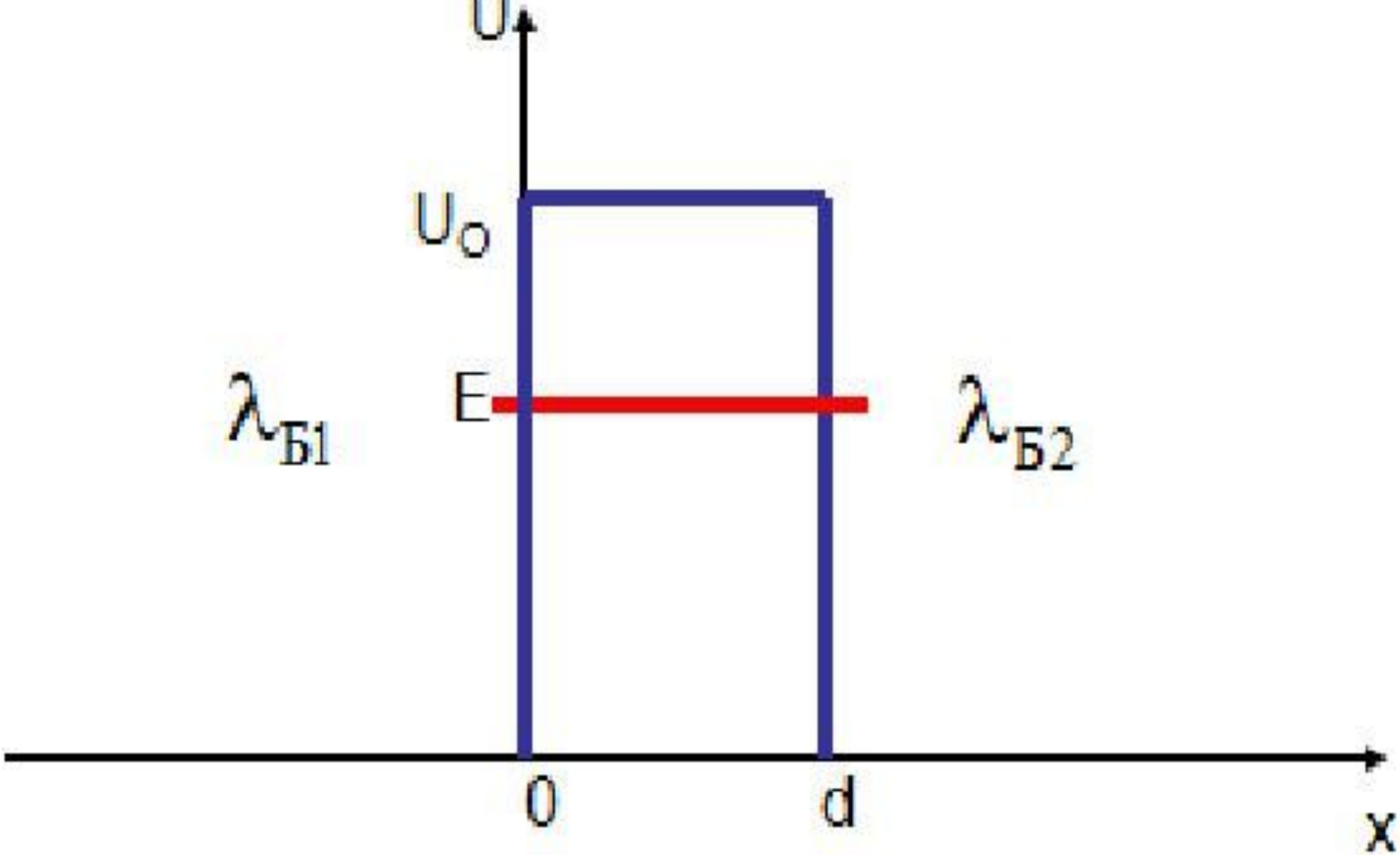
$$E - U_0 < 0$$

Решение данной задачи является сложным, поэтому ограничимся основными выводами.

Что происходит с микрочастицей в области потенциального барьера - неизвестно.

Достоверно известно лишь то, что частица была перед барьером, имея длину волны де Бройля $\lambda_{Б1}$, и стала находиться в области за потенциальным барьером, изменив свои волновые свойства и обладая длиной волны де Бройля $\lambda_{Б2}$.

Область потенциального барьера



На отрезке $\Delta x = d$ неопределённость импульса Δp составляет величину $\boxed{\Delta p = \frac{\hbar}{d}}$

Связанная с этим разбросом неопределённость кинетической энергии

$$\boxed{\Delta E = \frac{\Delta p^2}{2m}}$$

может оказаться достаточной для того, чтобы полная энергия частицы E оказалась больше потенциальной энергии U_O.

Частица в этих условиях преодолевает область потенциального барьера.

Поскольку в области потенциального барьера для квантовой частицы «работает» соотношение неопределённостей, то **координата и импульс частицы не могут иметь определенных значений.**

Это означает, что не могут быть одновременно точно определены кинетическая E_K и потенциальная U энергии.

Кинетическая энергия зависит от импульса, а потенциальная от координат.

Таким образом, хотя полная энергия частицы имеет определенное значение Е, она не может быть представлена в **виде суммы точно определенных** энергий $E_к$ и U.

Ясно, что в этом случае заключение об отрицательности кинетической энергии $E_к$ «внутри туннеля» становится бессмысленным.

Вероятность прохождения частицы через барьер названа **коэффициентом прозрачности D.**

$$D = D_O e^{-\frac{2d}{\hbar}\sqrt{2m\left(U_0 - E\right)}}$$

Вероятность прохождения частицы через потенциальный барьер сильно зависит от:

- **ширины барьера d,**
- **величины** $U_0 - E$.

Коэффициент прозрачности сильно уменьшается при увеличении массы частицы m.

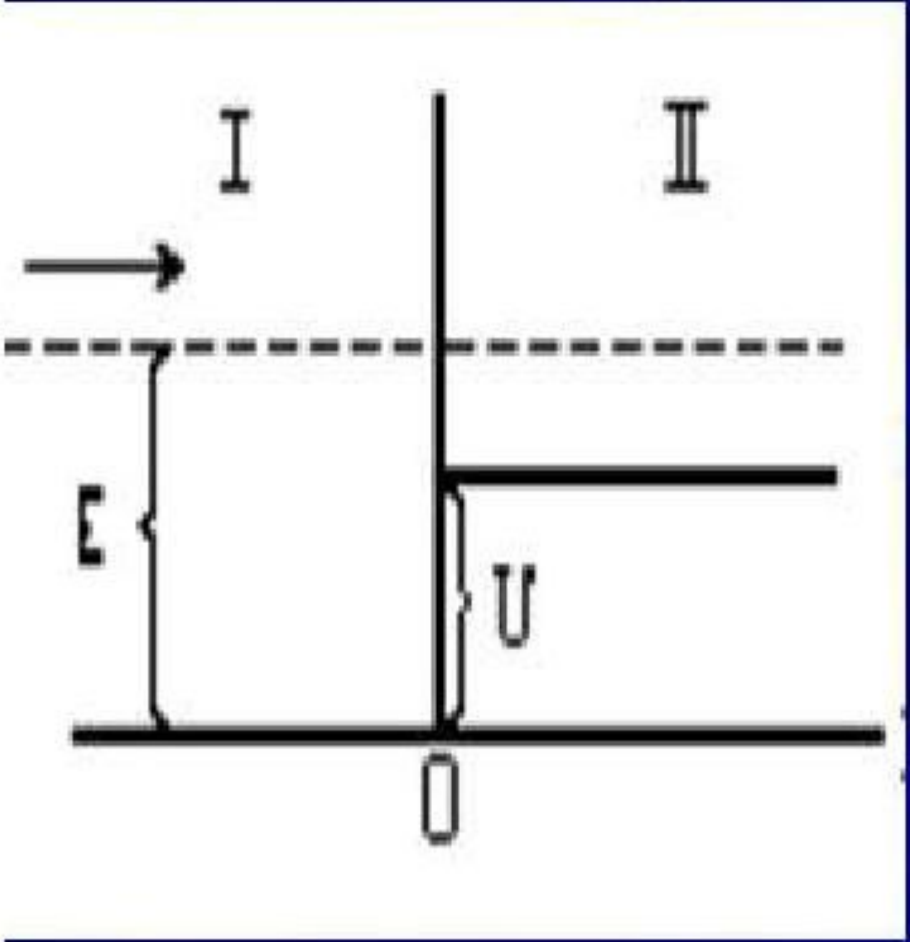
Если при какой-то ширине барьера коэффициент прочности D = 0,01, то **при увеличении ширины барьера в 2 раза** величина $D = 0{,}01^2$, **коэффициент прозрачности уменьшается в 100 раз.**

Тот же эффект вызвало бы вырастание в 4 раза величины $U_0 - E$.

При преодолении потенциального барьера частица как бы проходит через **«туннель»** в этом барьере, в связи с чем рассмотренное нами явление называют **туннельным эффектом**.

Описание туннельного эффекта

1. Коэффициент преломления n волн де Бройля на границе низкого потенциального барьера бесконечной ширины



$$n = \frac{\lambda_1}{\lambda_2} = \frac{k_2}{k_1},$$

- где λ_1 и λ_2 —длины волн де Бройля в областях I и II (частица движется из области I в II);

  k_1 и k_2 – соответствующие значения волновых чисел.

Описание туннельного эффекта

2. Коэффициенты отражения ρ и пропускания τ волн де Бройля через низкий (U < E) потенциальный барьер бесконечной ширины

$$\rho = \left| \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right|^2 \qquad \tau = \frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2}$$

где k_1 и k_2 – волновые числа волн де Бройля в областях I и II.

Описание туннельного эффекта

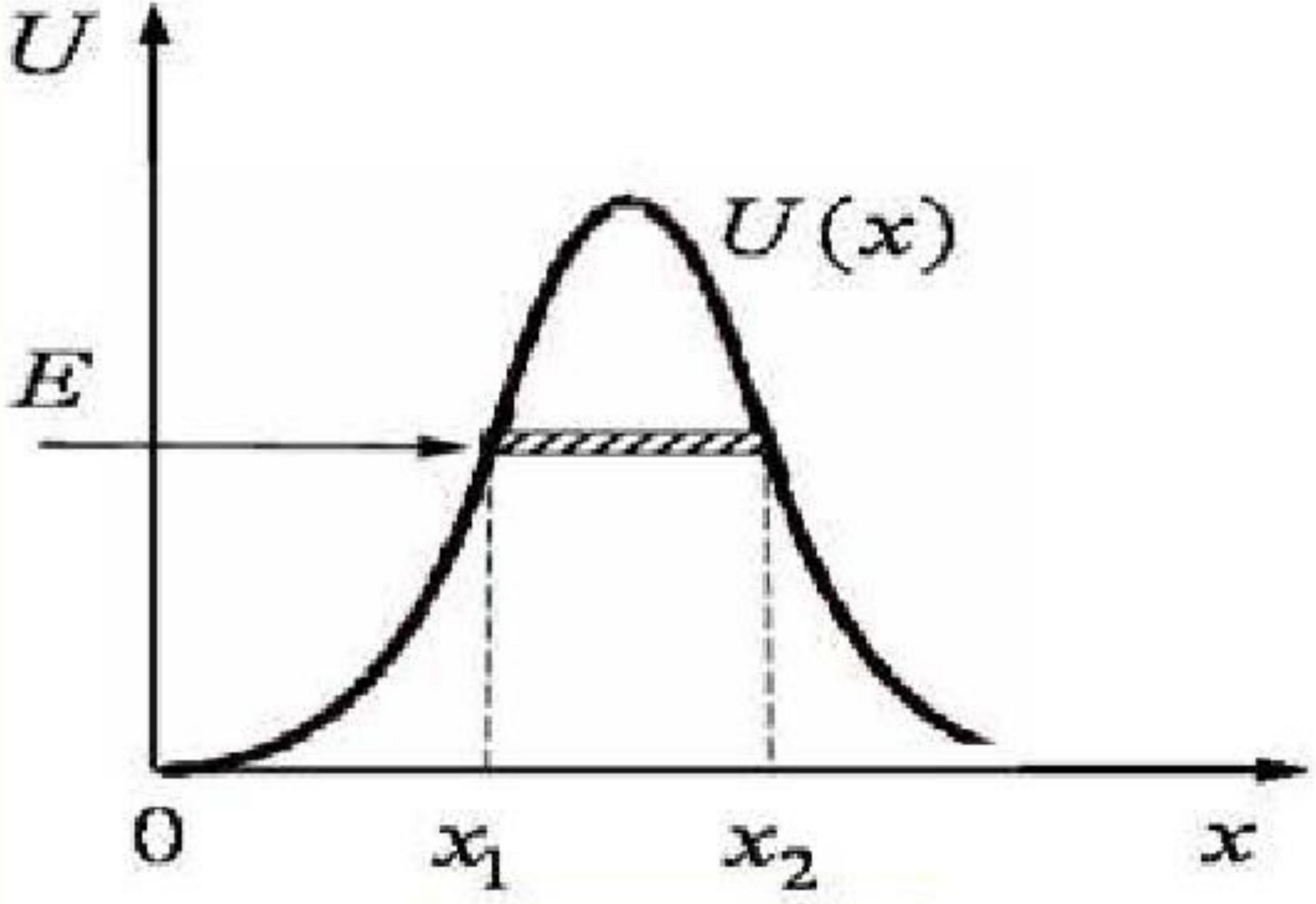
3. Коэффициент прозрачности D прямоугольного потенциального барьера конечной ширины

$$D = D_0 \exp\left[-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U-E)}\cdot d\right]$$

- где U – высота потенциального барьера, E – энергия частицы, D_0 = 1 (постоянный множитель, который можно приравнять единице), d – ширина барьера, m – масса частицы.

- Из выражения следует, что D сильно зависит от массы частицы, ширины барьера и от (U – E); чем шире барьер, тем меньше вероятность прохождения сквозь него частицы.

Потенциальный барьер произвольной формы



Коэффициент прозрачности для **потенциального барьера произвольной формы** имет вид:

$$D \approx e^{-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2m\left(U_0 - E\right)}dx}$$

где $U = U(x)$.

Примером проявления туннельного эффекта могут служить следующие явления природы:

- **радиоактивность;**
- **холодная эмиссия электронов из металла;**
- **ионизация атома в поле сильной электромагнитной волны;**
- **ионизация атома в сильном электрическом поле.**

Линейный гармонический осциллятор

- **Линейным (одномерным) гармоническим осциллятором** называется частица с массой **m**, которая колеблется с собственной циклической частотой ω_0 вдоль некоторой оси OX под действием квазиупругой силы **F**, пропорциональной отклонению **x** частицы от положения равновесия: **F= - k·x.**

- Здесь $k = m\omega_0^2$ – коэффициент квазиупругой силы.
- **Потенциальная энергия гармонического осциллятора**

$$U(x) = \frac{m\omega_0^2 x^2}{2}$$

Уравнение Шредингера для линейного гармонического осциллятора

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{m\omega_0^2 x^2}{2}\right)\psi = 0$$

Собственные значения энергии гармонического осциллятора

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\cdot\hbar\cdot\omega_0$$

$$(n = 0{,}1{,}2....)$$

Формула показывает, что энергия квантового осциллятора может иметь лишь дискретные значения, т.е. квантуется. Энергия ограничена снизу отличным от нуля, как и для прямоугольной «ямы» с бесконечно высокими «стенками», минимальным значением энергии – энергии нулевых колебаний.

Энергия нулевых колебаний гармонического осциллятора

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar \cdot \omega_0 = \frac{1}{2} h \cdot \nu_0$$ при $(n = 0)$

- Наличие нулевых колебаний означает, что **частица не может находиться на дне «потенциальной ямы»**, причем этот вывод не зависит от ее формы.
- Действительно, «падение на дно ямы» связано с обращением в нуль импульса частицы, а вместе с тем и его неопределенности. Тогда неопределенность координаты становится сколь угодно, большой, что противоречит пребыванию частицы в «потенциальной яме».