

***ЭЛЕМЕНТЫ
КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ***

План лекции

- I. Волновая функция.
- I. Уравнение Шрёдингера.
- I. Частица в одномерной потенциальной яме бесконечной глубины.
- V. 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 времени...

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

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

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

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

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

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

- ❑ 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 $\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_n$, то она может находиться в состоянии, описываемом линейной комбинацией этих функций

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

где C_n ($n = 1, 2, 3, \dots$) – 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)

$$E_1, E_2, \dots, E_n$$

2. Каков вид волновых функций?

$$\Psi_1 \quad \Psi_2 \quad \dots \quad \Psi_n$$

3. В какой точке силового поля локализована микрочастица?

$$|\Psi_1|^2, |\Psi_2|^2, \dots, |\Psi_n|^2$$

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

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

должен быть конечным. Это условие

сводится к *условию нормировки вероятностей*.

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

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
- $U \equiv U(x, y, z)$, 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:

$$x = x_0 \cdot \sin(\omega t + \alpha)$$

По аналогии обозначим величину

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

Тогда решением уравнения Шредингера является выражение:

$$\psi(x) = \psi_0 \sin(\omega t + \alpha)$$

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

Область локализации частицы определяет квадрат модуля волновой функции.

$$|\Psi|^2 = \Psi_0^2 \sin^2(\omega x + \alpha)$$

Поскольку

$$\left(\sin^2 x = \frac{1}{2} \right)$$

, то

$$|\Psi|^2 = \frac{\Psi_0^2}{2}$$

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

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

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

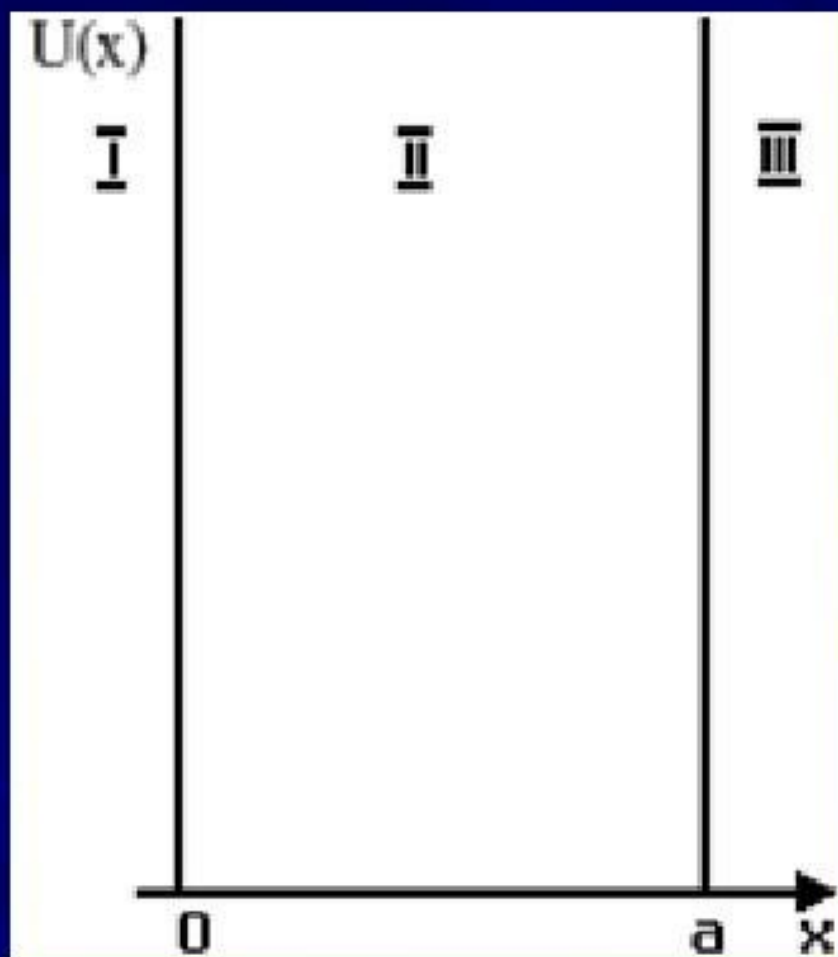
p

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 U_{\max} .
- 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

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

Частица в одномерной потенциальной яме бесконечной глубины

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

$$U = 0 \quad \text{при} \quad 0 \leq x \leq a$$

$$U = \infty \quad \text{при} \quad x \leq 0 \quad \text{и} \quad x \geq a,$$

то яма имеет «**плоское дно**».

Одномерное уравнение Шредингера для частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме

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

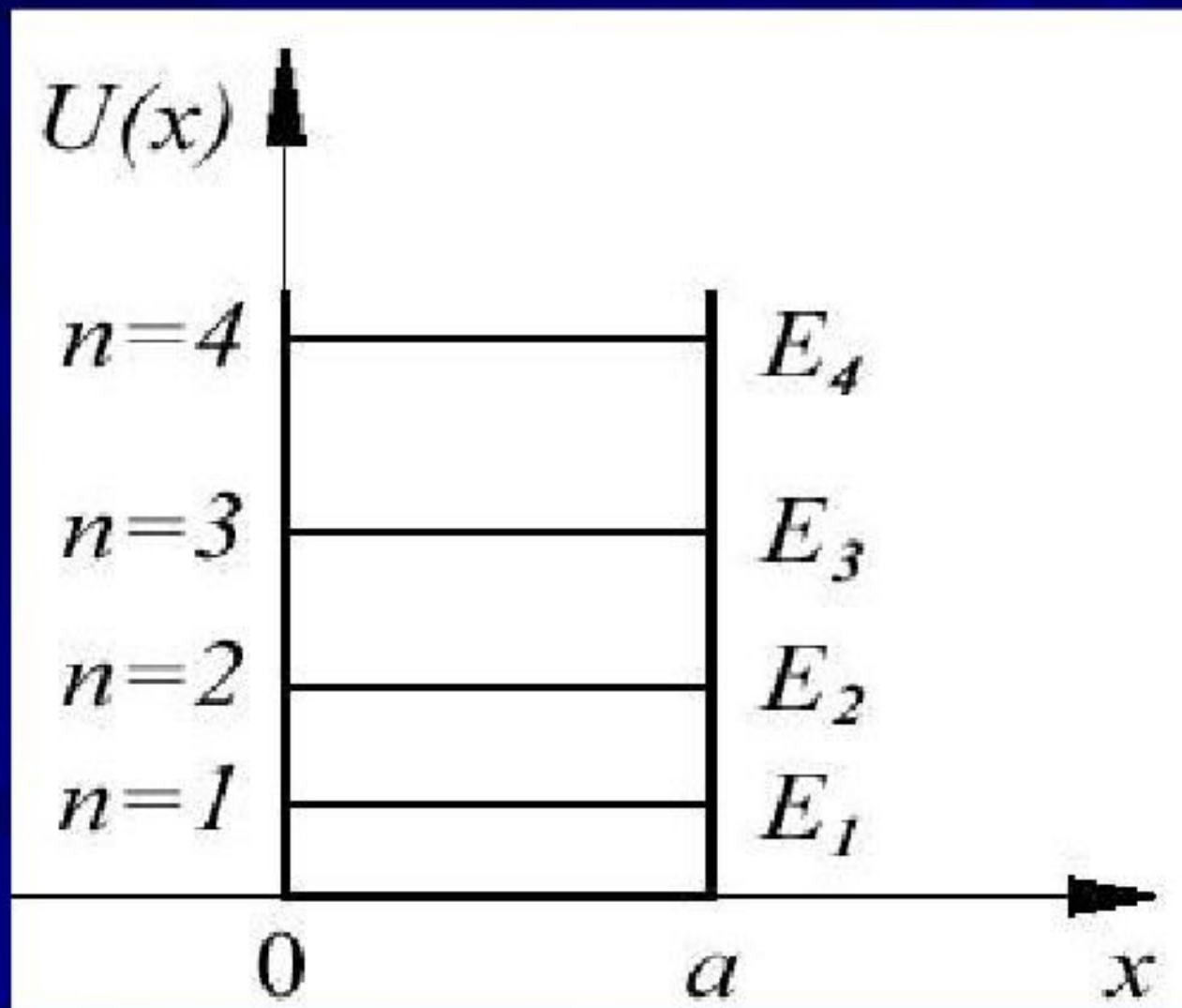
Собственное значение энергии E_n частицы, находящейся на **n -м** энергетическом уровне в бесконечно глубокой одномерно прямоугольной «**потенциальной яме**»

$$E_n = \frac{\pi^2 \cdot \hbar^2}{2m \cdot a^2} n^2$$

$$(n = 1, 2, 3, \dots)$$

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

$$E_n = n^2 E_1$$

Энергия первого (**основного**) состояния:

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

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

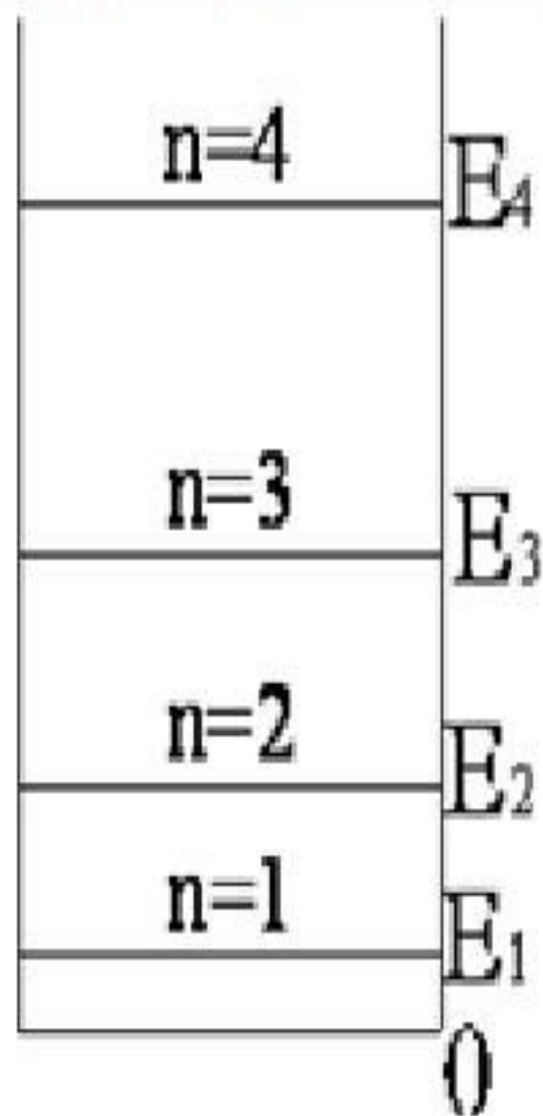
Особенности энергетического спектра

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

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**:

$$\Psi_n = \Psi_0 \sin \omega x$$

, где

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

Тогда

$$\Psi(x) = \Psi_0 \cdot \sin \frac{n\pi x}{a}$$

Для нахождения **амплитуды волновой функции** Ψ_0 воспользуемся **условием нормировки**, в котором пределы интегрирования будут от 0 до a (частица существует только внутри ямы).

$$\int_0^a \psi^2 dx = 1$$



$$\psi_0^2 \int_0^a \sin^2 \frac{n\pi x}{a} dx = 1$$

$$\psi_0^2 \cdot \frac{a}{2} = 1$$

Амплитуда волновой функции

$$\psi_0 = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

Окончательно **волновые функции** запишутся как

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

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

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:

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

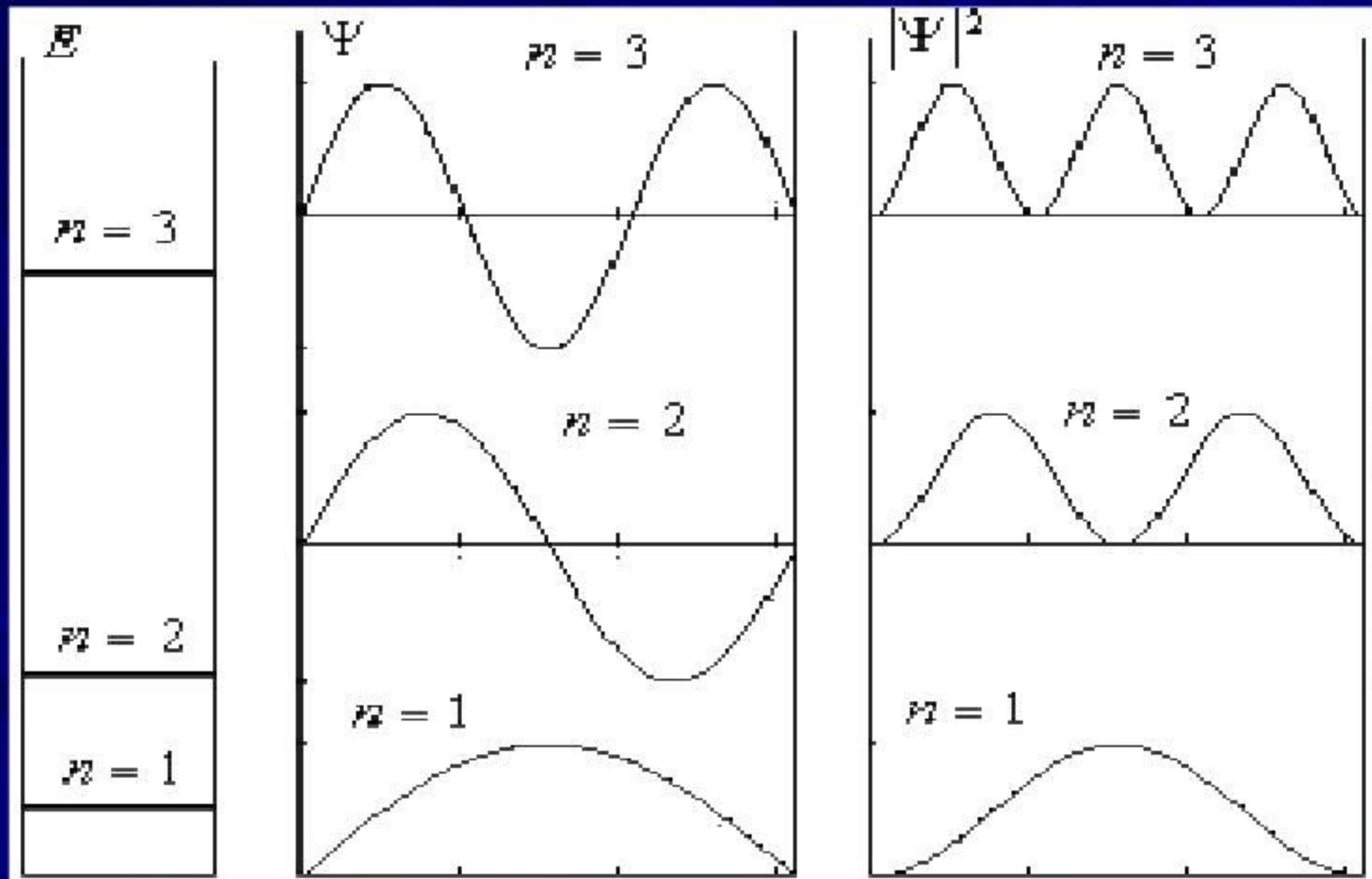
Область локализации частицы в потенциальной яме определяется через квадрат модуля волновой функции:

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

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

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

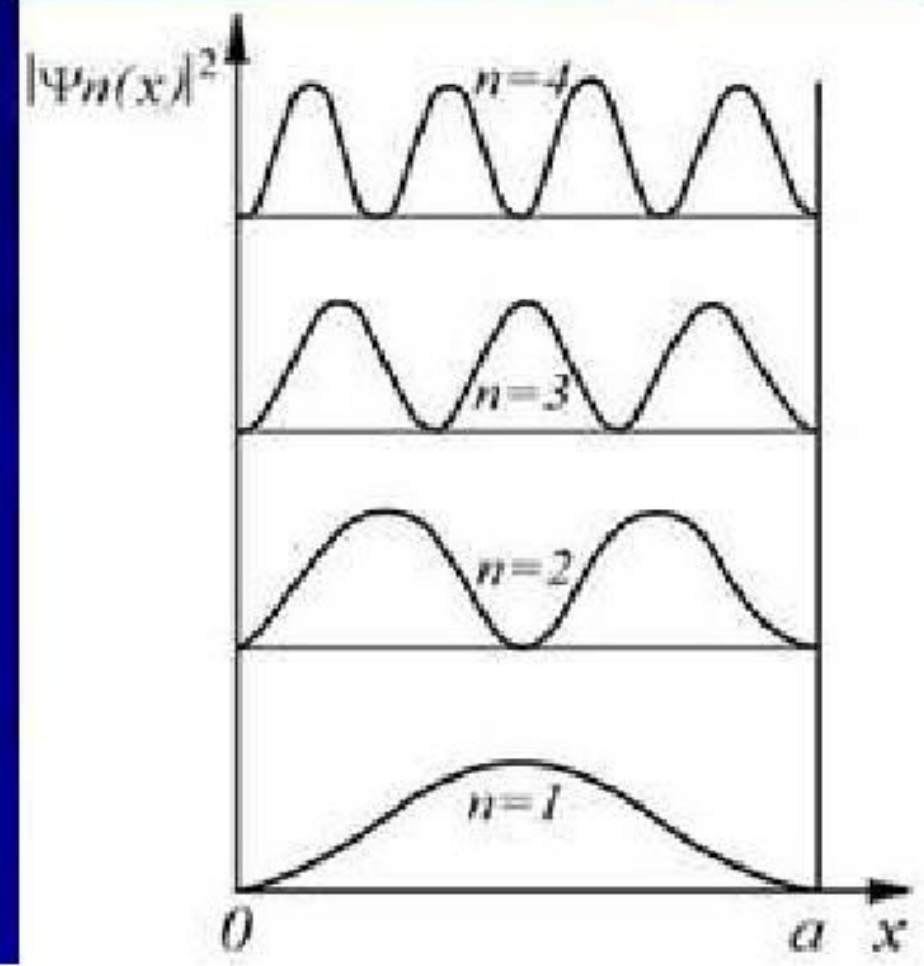
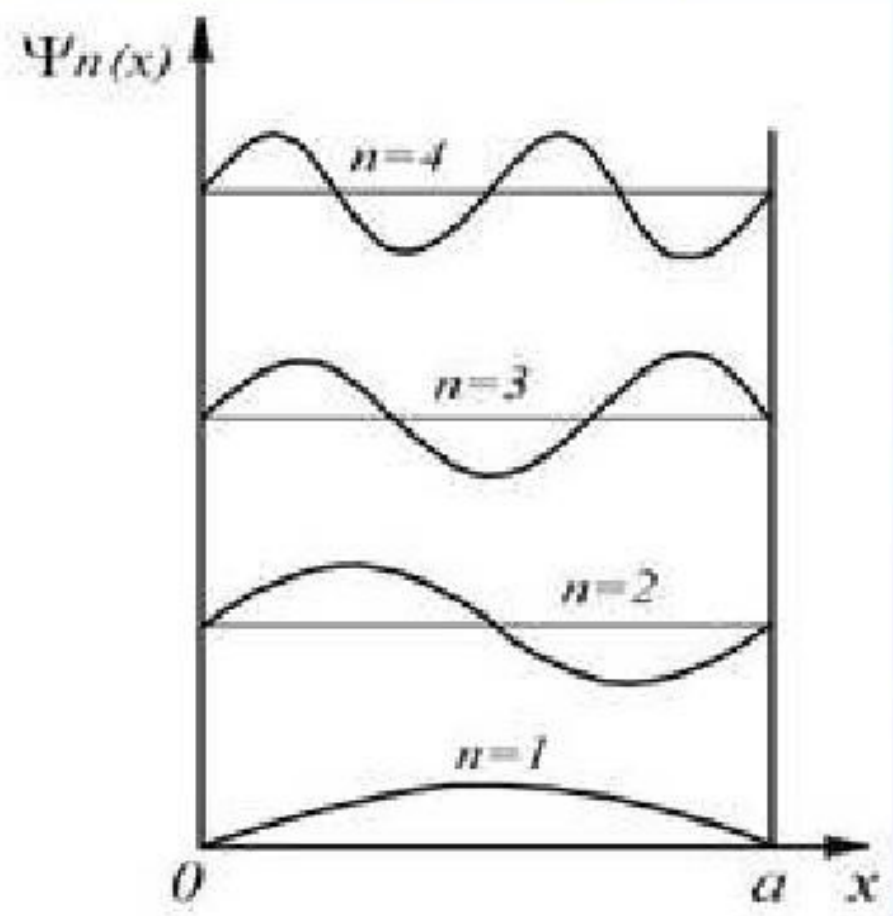
Уровни энергии, волновых функций распределения плотности вероятности по координате X



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 ;

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

- имеет **длину волны де Бройля**

$$\lambda_B = \frac{2a}{n} = 2a$$

- 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 $E_2 = 4E_1$;

- имеет длину волны де Бройля

$$\lambda_B = \frac{2a}{n} = a$$

- 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** ($\Pi \rightarrow \infty$), то она может находиться в любой точке ямы.

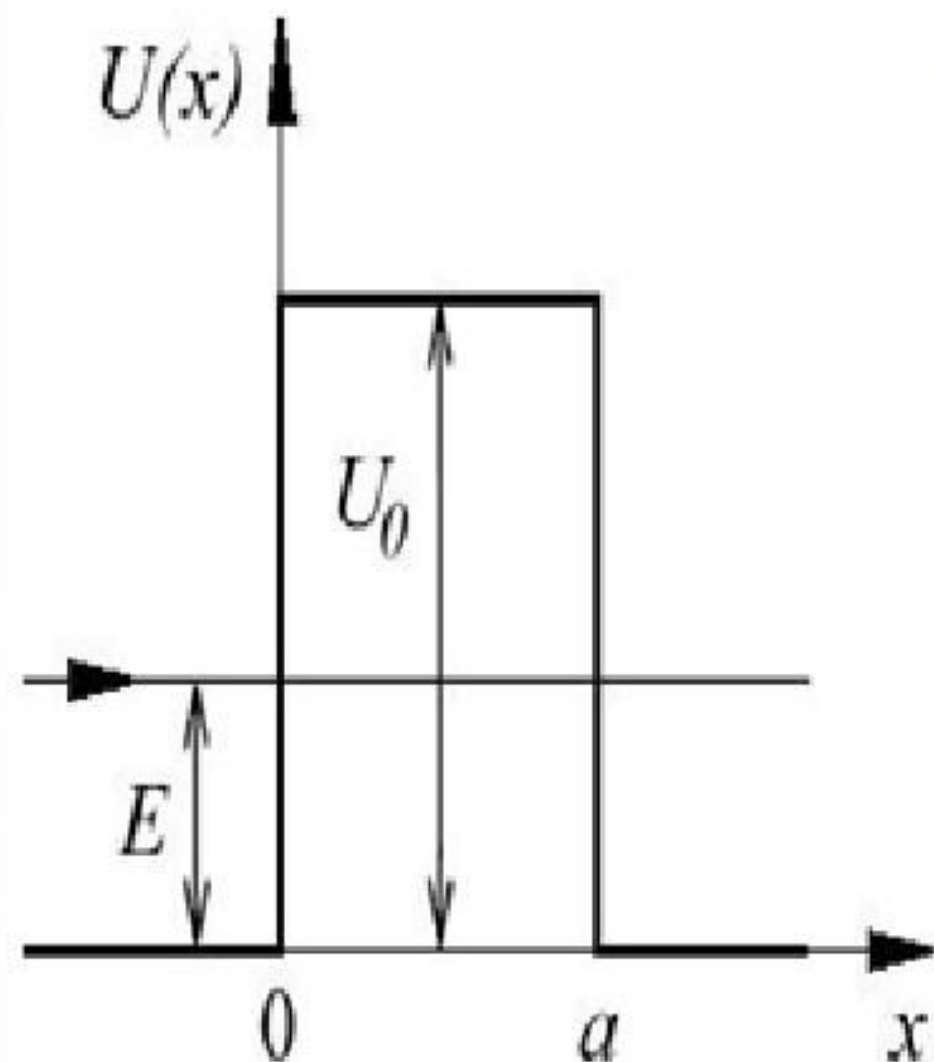
В этих условиях **частица может покинуть пределы ямы** и перейти в **область потенциального барьера**.

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 $0 \leq x \leq a$ 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

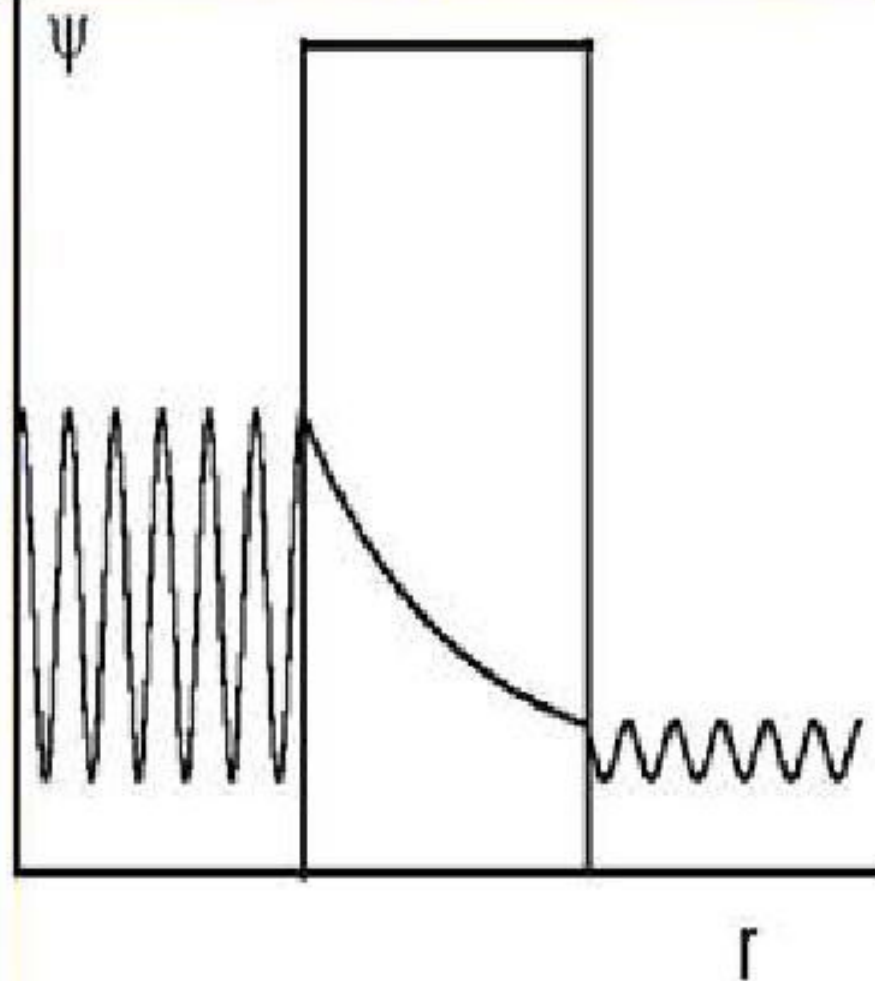
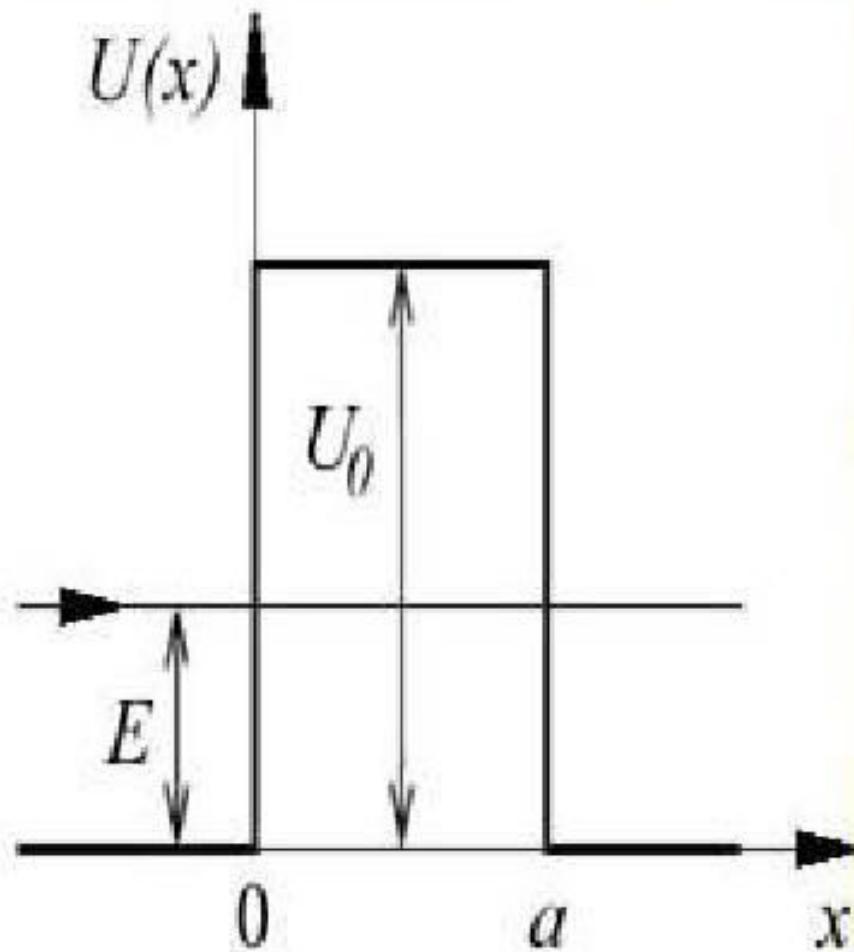
Поведение частицы с квантовой точки зрения

- 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

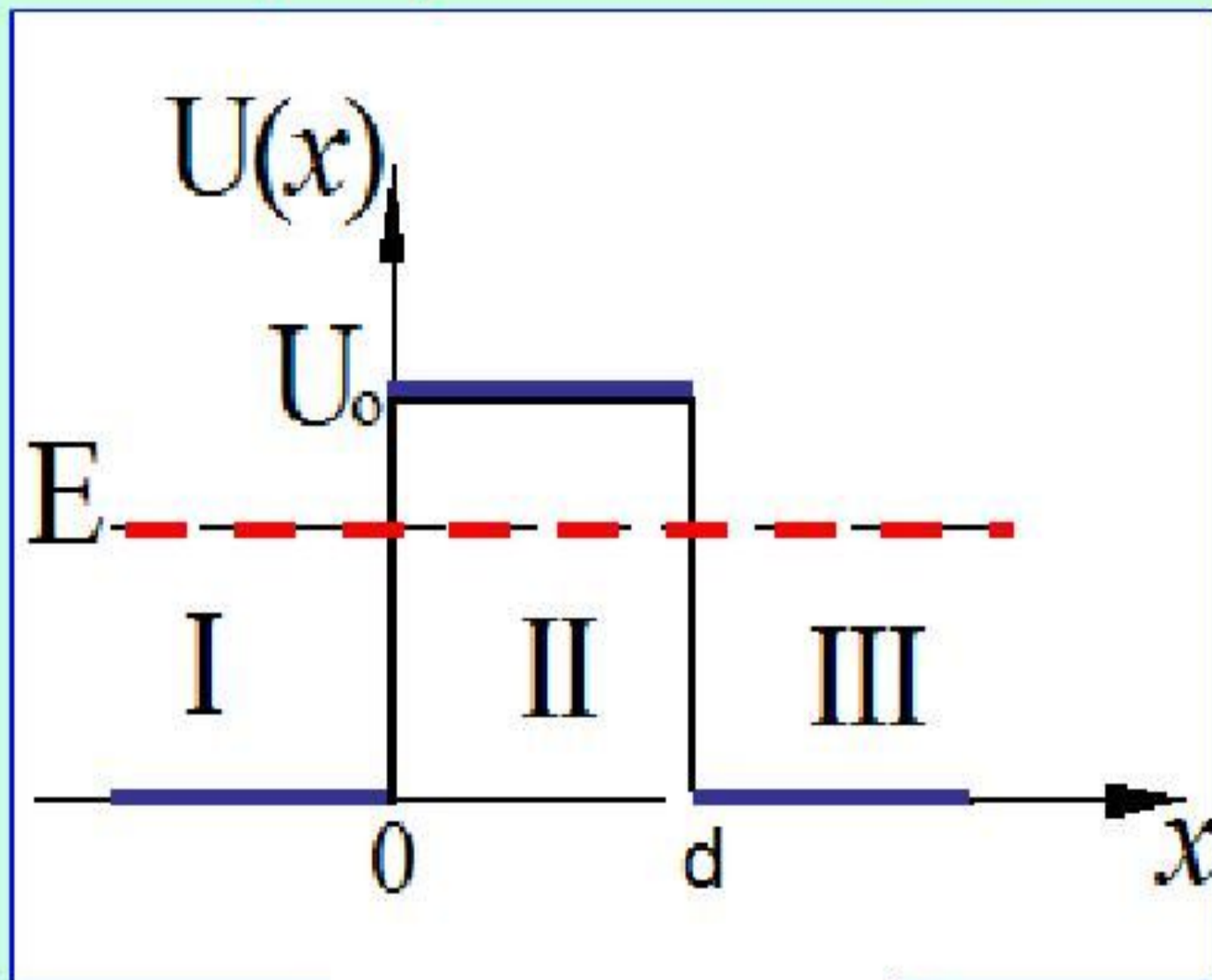
Туннельный эффект

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

Прхождение 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:

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

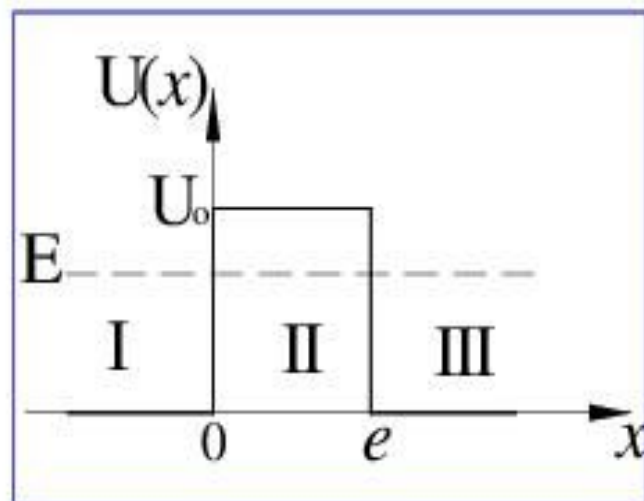
для областей I и III

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

для области II,

причем

$$E - U_0 < 0$$

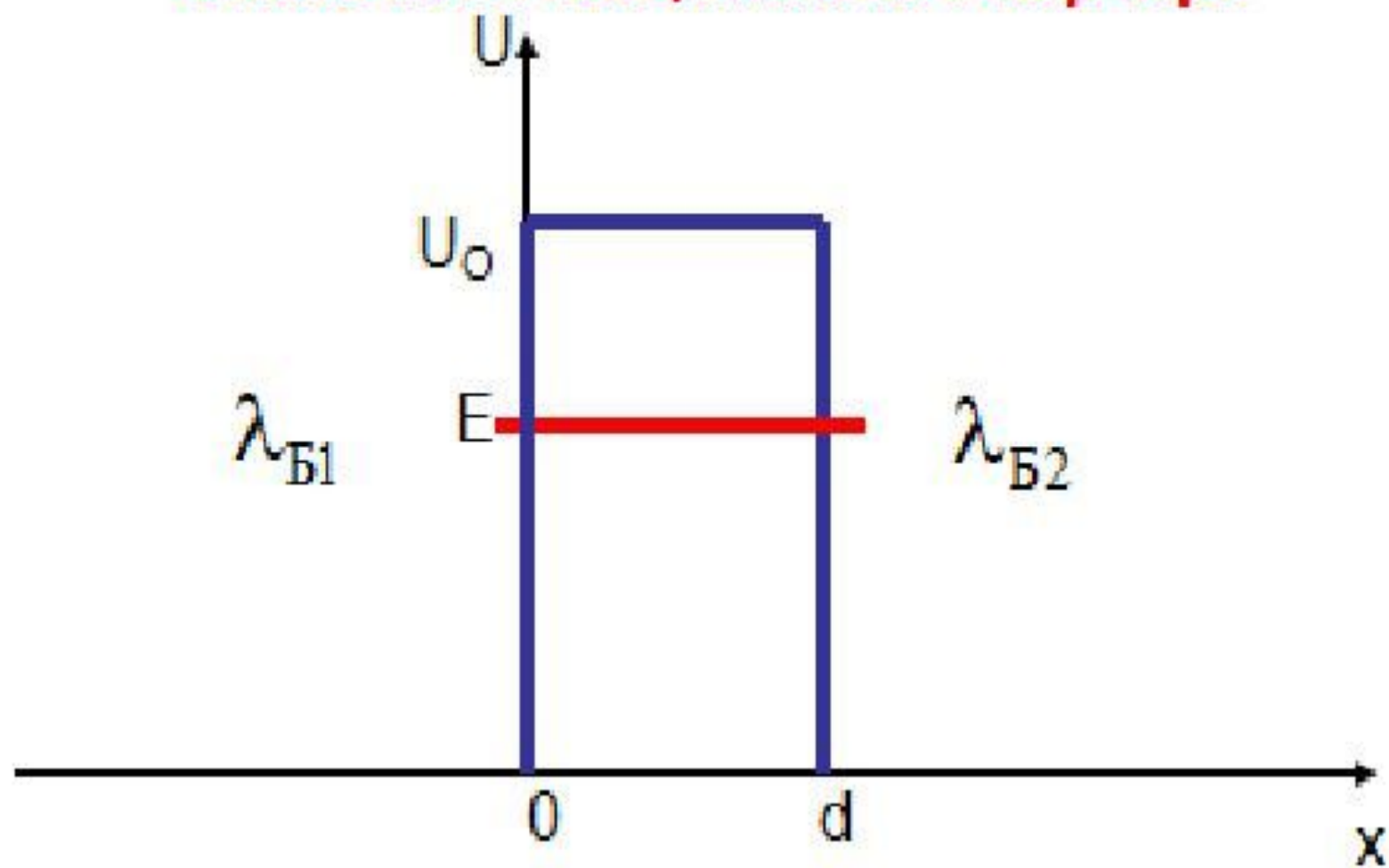


Решение данной задачи является сложным, поэтому ограничимся основными выводами.

Что происходит с микрочастицей в области потенциального барьера - неизвестно.

Достоверно известно лишь то, что частица была перед барьером, имея длину волны де Бройля λ_{B1} , и стала находиться в области за потенциальным барьером, изменив свои волновые свойства и обладая длиной волны де Бройля λ_{B2} .

Область потенциального барьера



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

Связанная с этим разбросом неопределённость кинетической энергии $\Delta E = \frac{\Delta p^2}{2m}$

может оказаться достаточной для того, чтобы полная энергия частицы E оказалась больше потенциальной энергии U_0 .

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 E , она не может быть представлена в **виде суммы точно определенных** энергий E_k и U .

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

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

$$D = D_0 e^{-\frac{2d}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}}$$

**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 .

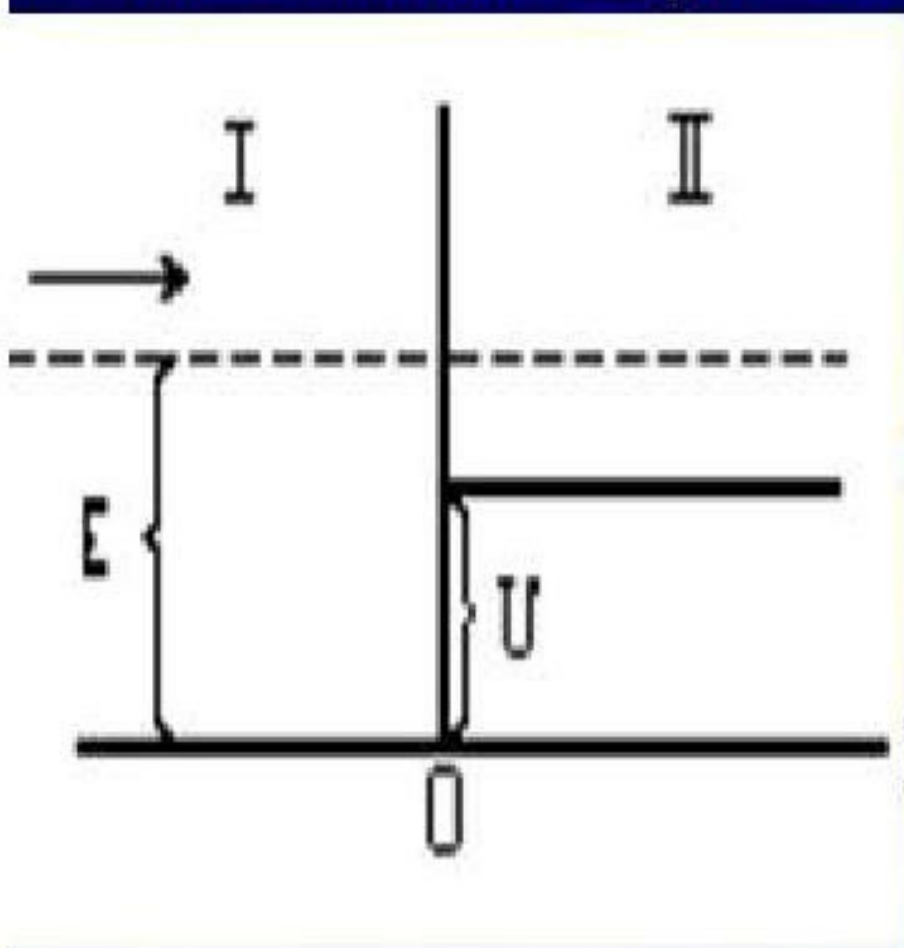
Если при какой-то ширине барьера коэффициент прочности $D = 0,01$, то **при увеличении ширины барьера в 2 раза величина $D = 0,01^2$, коэффициент прозрачности уменьшается в 100 раз.**

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

$$\rho = \left| \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right|^2$$

$$\tau = \frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2}$$

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

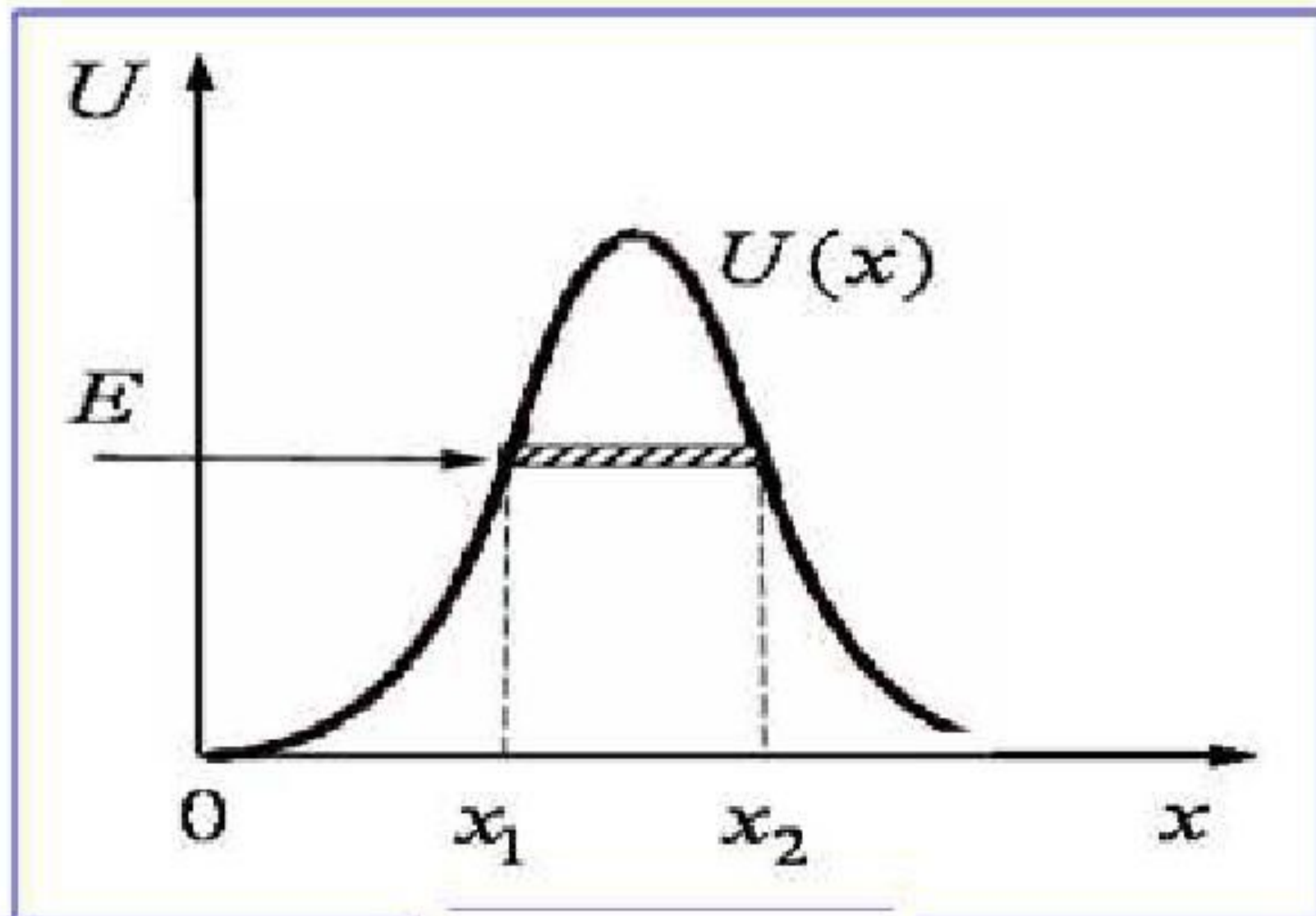
Описание туннельного эффекта

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** имеет вид:

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

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: $F = -k \cdot x$.

■ 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 осциллятора

значения

энергии

гармонического

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

$$(n = 0, 1, 2, \dots)$$

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».