x

Тема ПРИМЕНЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ШРЁДИНГЕРА

1. Движение свободной частицы

2. Частица в одномерной прямоугольной яме с бесконечными внешними «стенками»

3. Гармонический осциллятор

4. Прохождение частиц сквозь потенциальный барьер. Туннельный эффект

x

1. Движение свободной частицы

Свободная частица – частица, движущаяся в отсутствие внешних полей.

Т.к. на свободную частицу (пусть она движется вдоль оси x) силы не действуют, то ***потенциальная энергия частицы $U(x)=const$*** и ее можно принять равной нулю: ***($U=0$)***

Тогда ***полная энергия частицы совпадает с ее кинетической энергией***.

В таком случае ***уравнение Шредингера для стационарных состояний примет вид***

$$\boxed{\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}E\Psi=0} \qquad (1)$$

x

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}E\Psi=0 \qquad (1)$$

Прямой подстановкой можно убедиться в том, что частным ***решением уравнения*** (1) является функция

$$\Psi(x)=Ae^{ikx}$$

где A=const и k=const, с собственным значением энергии:

$$E=\frac{\hbar^2k^2}{2m} \qquad (2)$$

x

Из выражения (2) следует, что ***зависимость энергии от импульса***

$$\boxed{E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{p_x^2}{2m}}$$

оказывается ***обычной для нерелятивистских частиц.***

Следовательно, ***энергия свободной частицы может принимать любые значения*** (т.к. число может принимать любые значения), т.е. ее ***энергетический спектр является непрерывным***.

x

Таким образом, свободная частица описывается плоской монохроматической волной де Бройля.

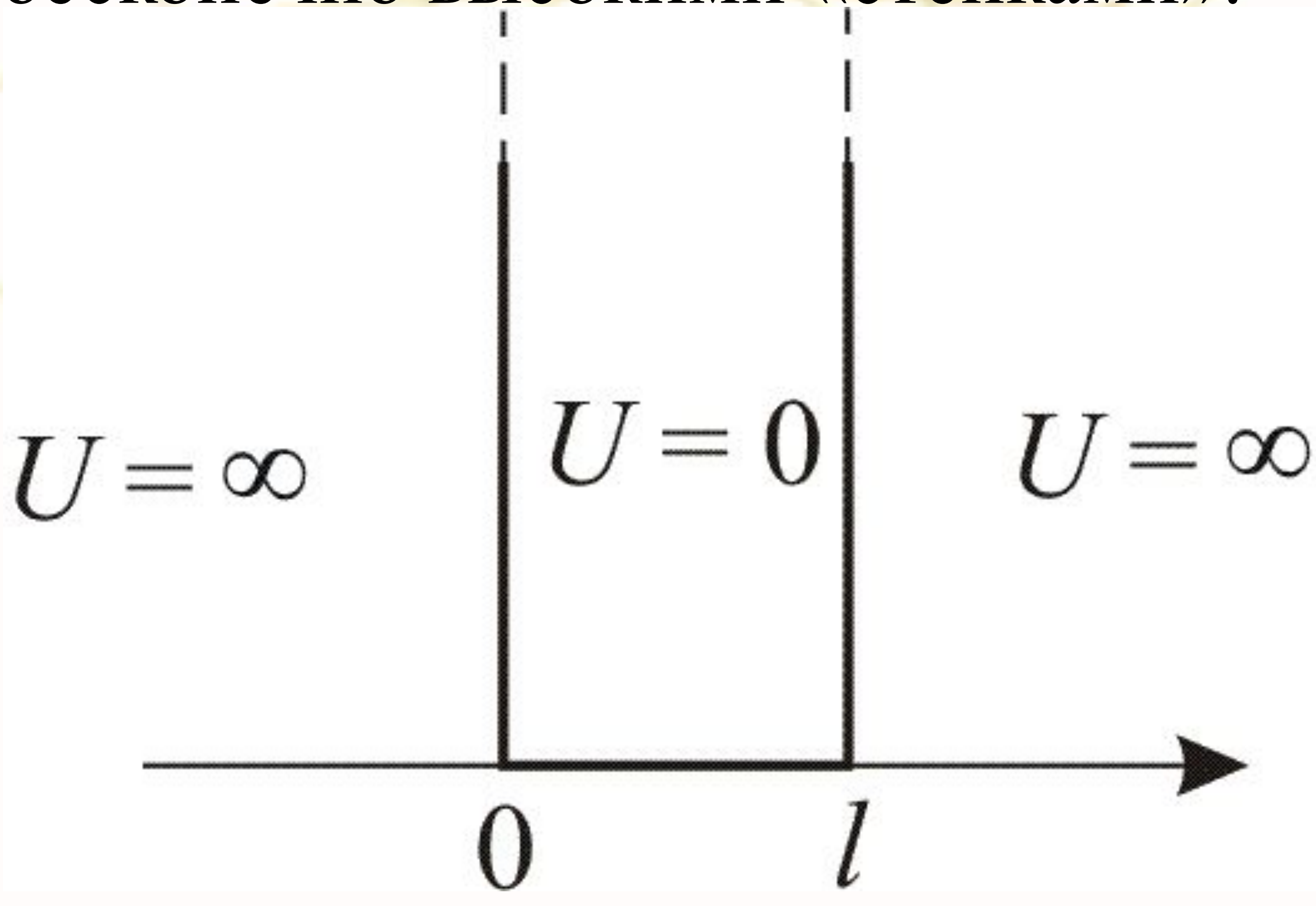
Этому способствует ***не зависящая от времени плотность вероятности обнаружения частицы в данной точке пространства.***

$$\boxed{|\Psi|^2 = \Psi\Psi^* = |A|^2}$$

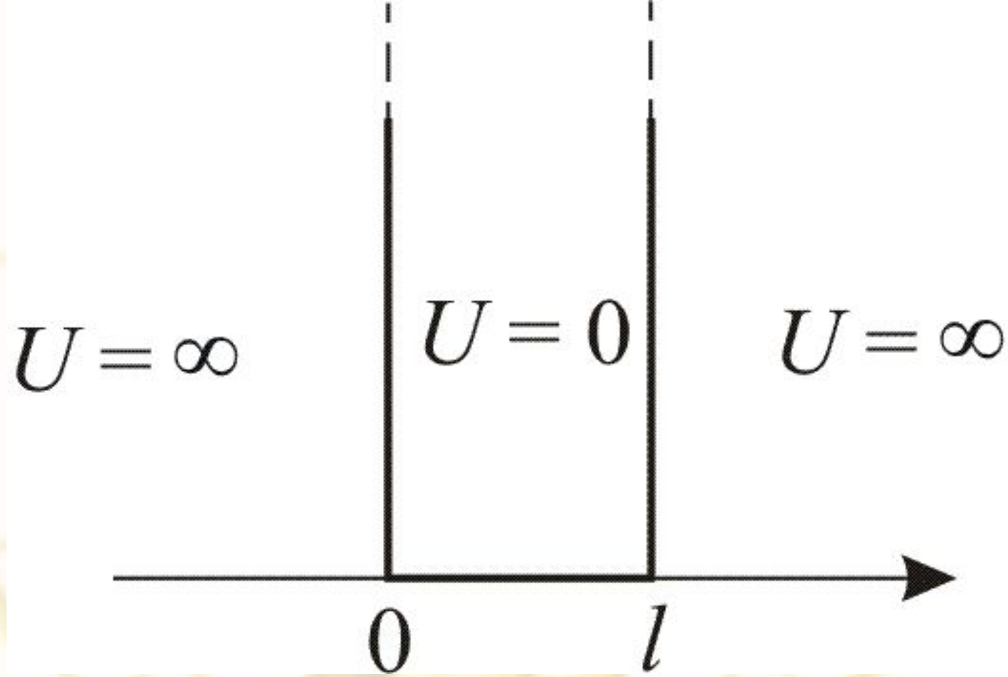
т.е. ***все положения свободной частицы являются равновероятностными.***

2. Частица в одномерной прямоугольной яме с бесконечными внешними «стенками»

Проведем качественный анализ решений уравнения Шредингера, применительно к частице в яме с бесконечно высокими «стенками».



x



Такая яма описывается потенциальной энергией вида

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

где l – ширина «ямы», а энергия отсчитывается от ее дна. (для простоты принимая, что частица движется вдоль оси x)

x

Уравнение Шредингера для стационарных состояний в случае одномерной задачи запишется в виде:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - U\right) = 0 \qquad (5)$$

x

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 волновая функция также должна обращаться в нуль. Следовательно, ***граничные условия*** в таком случае имеют вид

$$\Psi(0) = \Psi(l) = 0 \qquad (6)$$

x

В пределах «ямы» ($0 \le \boldsymbol{x} \le \boldsymbol{l}$) уравнение Шредингера (5) сведется к уравнению

$$\boxed{\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + k^2 \Psi = 0,} \qquad (7)$$

где $k^2 = \dfrac{2mE}{\hbar^2}$.

Общее решение дифференциального уравнения (7)

$$\boxed{\Psi(x) = A \sin kx}$$

Уравнение $\Psi(l) = A \sin kl = 0$ выполняется только при

$$\boxed{k = \frac{n\pi}{l}}$$

x

Отсюда следует, что:

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ml^2} \qquad (11)$$

где $n = 1, 2, 3\ldots$

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**.

x

Квантовые значения энергии E_n называется уровнями энергии, а ***число n, определяющее энергетические уровни - 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.***

x

Найдем собственные функции:

$$\Psi_n(x) = A\sin\frac{n\pi}{l}x.$$

Постоянную интегрирования A найдем ***из условия нормировки:***

$$A^2\int_0^l \sin^2\frac{\pi n}{l}x\mathrm{d}x = 1$$

В результате интегрирования получим

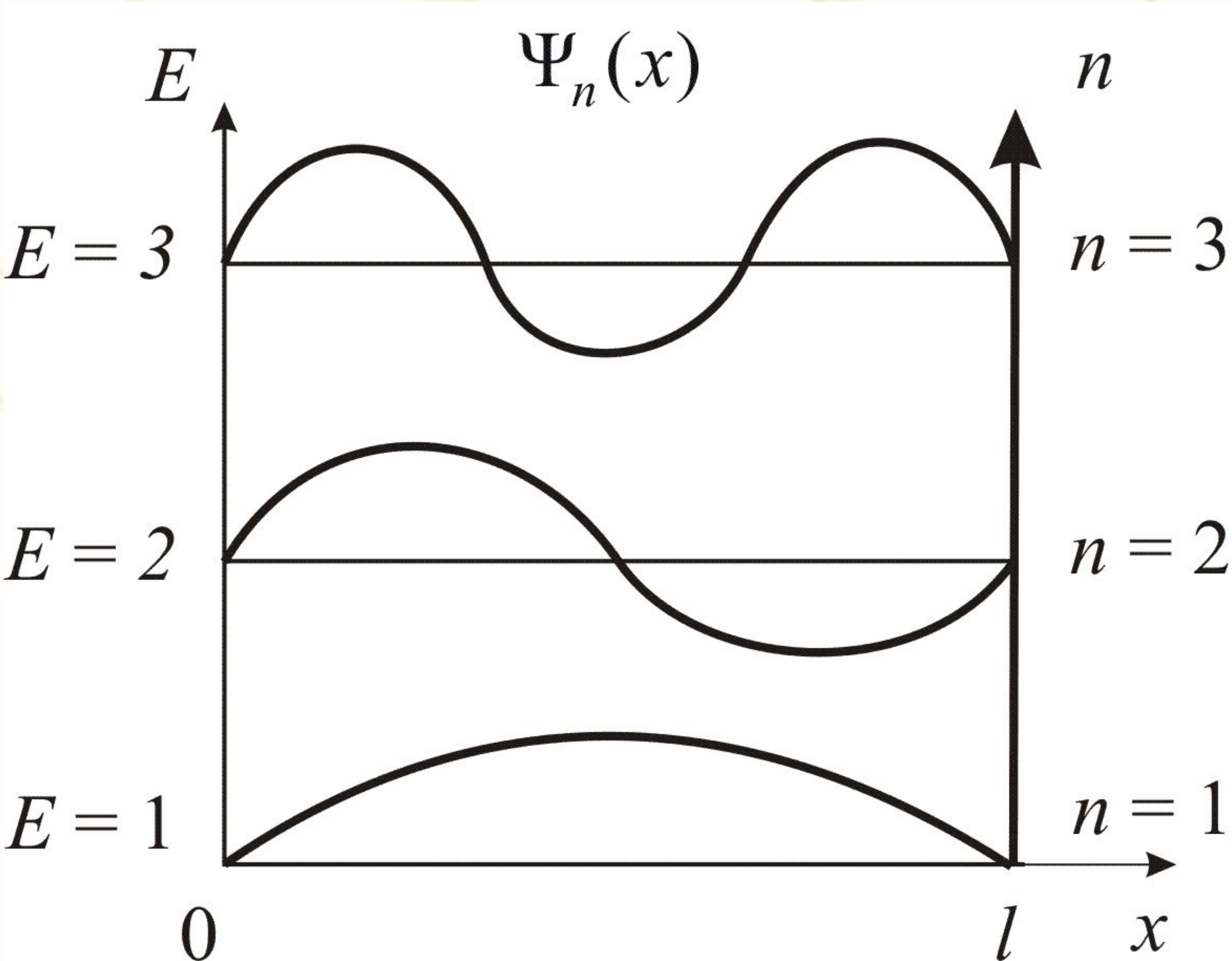
$$A = \sqrt{\frac{2}{l}}$$

Соответственные функции будут иметь вид:

$$\boxed{\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}}\sin\left(\frac{n\pi}{l}x\right)}$$

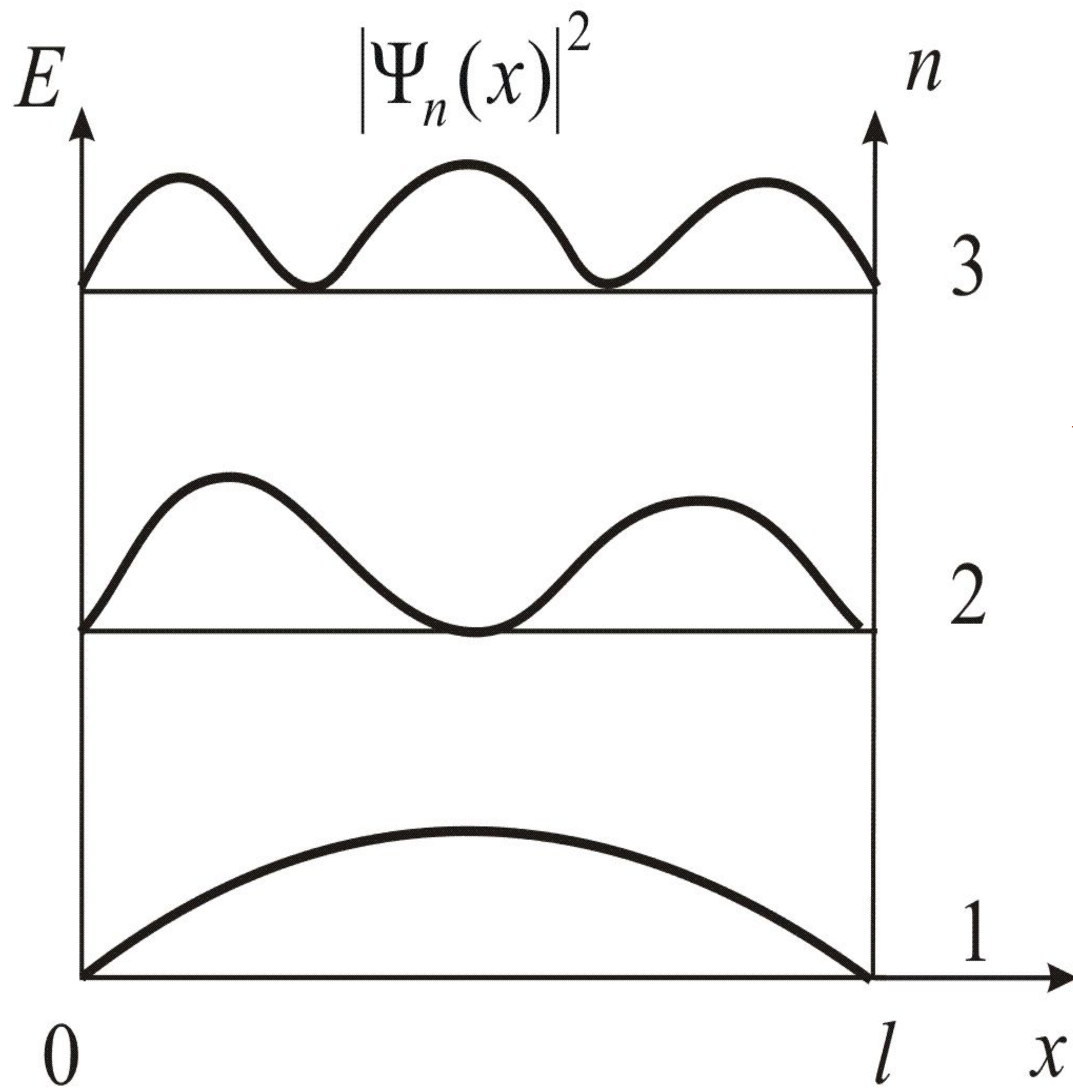
где $n = 1, 2, 3\ldots$

Графики собственных функций $\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}}\sin\left(\frac{n\pi}{l}x\right)$ соответствующие уровням энергии при $n = 1, 2, 3\ldots$



x

Плотность вероятности $|\Psi(x)|^2$ *обнаружения частицы на различных расстояниях* от «стенок» ямы для $n = 1, 2, 3$



В квантовом состоянии с n = 2 частица не может находиться в центре ямы, в то время как одинаково может пребывать в ее левой и правой частях.

Такое поведение частицы указывает на то, что представления о траекториях частицы в квантовой механике несостоятельны.

x

Из выражения $$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ml^2}$$

следует, что ***энергетический интервал между двумя соседними условиями*** равен

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

Например, для электрона при размерах ямы l=10^{-10}м (свободные электроны в металле)

$$\Delta E_n \approx 10^{-35}\ n\ \text{Дж} \approx 10^{-16}\ n\ \text{Эв},$$

т.е. энергетические уровни расположены столь тесно, что спектр можно считать практически непрерывным.

x

Если же размеры ямы соизмеримы с размерами стенки ($l \approx 10^{-10}$ м), то для электрона

$$\Delta E_n \approx 10^{-17}\, n \text{ Дж} \approx 10^{-2}\, n \text{ Эв},$$

т.е. получаются явно дискретные значения энергии (линейчатый спектр).

Т.о., ***применение уравнения Шредингера*** к частице в «потенциальной яме» с бесконечно высокими “стенками” ***приводит к квантовым значениям энергии***, в то время как классическая механика на энергию этой частицы лишних ограничений не накладывает.

x

Кроме того, ***квантово-механическое рассмотрение этой задачи*** приводит к выводу, что ***частица в потенциальной яме*** с бесконечно высокими «стенками» ***не может иметь энергию, меньшую, чем минимальная энергия равная***

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2}$$

Наличие отличной от нуля минимальной энергии не случайно и вытекает ***из соотношения неопределенностей.*** Докажем это:

x

Неопределенность координаты Δx частицы в яме шириной l равна $\boldsymbol{\Delta x = l}$.

Тогда согласно соотношению неопределенностей, ***импульс не может иметь точное***, в данном случае, ***нулевое***, значение. ***Неопределенность импульса:***

$$\Delta p \approx \frac{\hbar}{l}.$$

Такому разбросу значений импульса соответствует ***минимальная кинетическая энергия:***

$$\boxed{E_{\min} \approx \frac{\Delta p^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2}}$$

Все остальные уровни имеют энергию, превышающую это значение

x

Из уравнений (5) и (11) следует, что ***при больших квантовых числах*** ***n>>1***

$$\frac{\Delta E_n}{E_n} \approx \frac{2}{n} << 1$$

т.е. ***соседние уровни расположены тесно: тем теснее, чем больше n.***

Если *n* очень велико, то можно говорить о практически непрерывной последовательности уровней и характерная особенность квантовых процессов ***– дискретность – сглаживается.***

Этот результат является частным случаем ***принципа соответствия Бора*** (1923 г.) согласно которому законы квантовой механики должны при больших значениях квантовых чисел переходить в законы классической физики.

Принцип соответствия:

всякая новая, более общая теория, являющаяся развитием классической, не отвергает ее полностью, а включает в себя классическую теорию, указывая границы ее применимости, причем в определенных предельных условиях новая теория переходит в старую.

x

3. Гармонический осциллятор

Гармоническим осциллятором называют частицу, совершающую одномерное движение под действием квазиупругой силы ***F=kx.***

Потенциальная энергия частицы

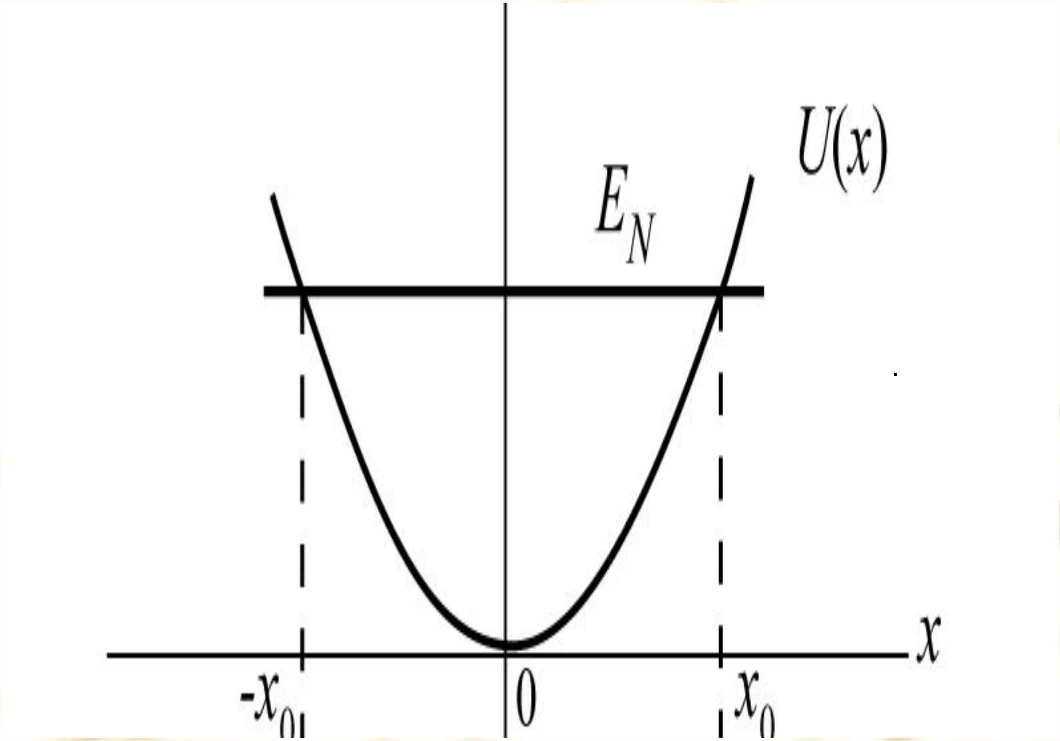
$$U = kx^2 / 2$$

или

$$U = \frac{m\omega^2 x^2}{2},$$

где $\omega = \sqrt{k/m}$

График потенциальной энергии частицы:



В точках с координатами ***–x_0 и +x_0***, полная энергия равна потенциальной энергии. Поэтому ***с классической точки зрения частица не может выйти за пределы области –x_0 и +x_0***

x

Гармонический осциллятор в квантовой механике - квантовый осциллятор - описывается уравнением Шредингера:

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

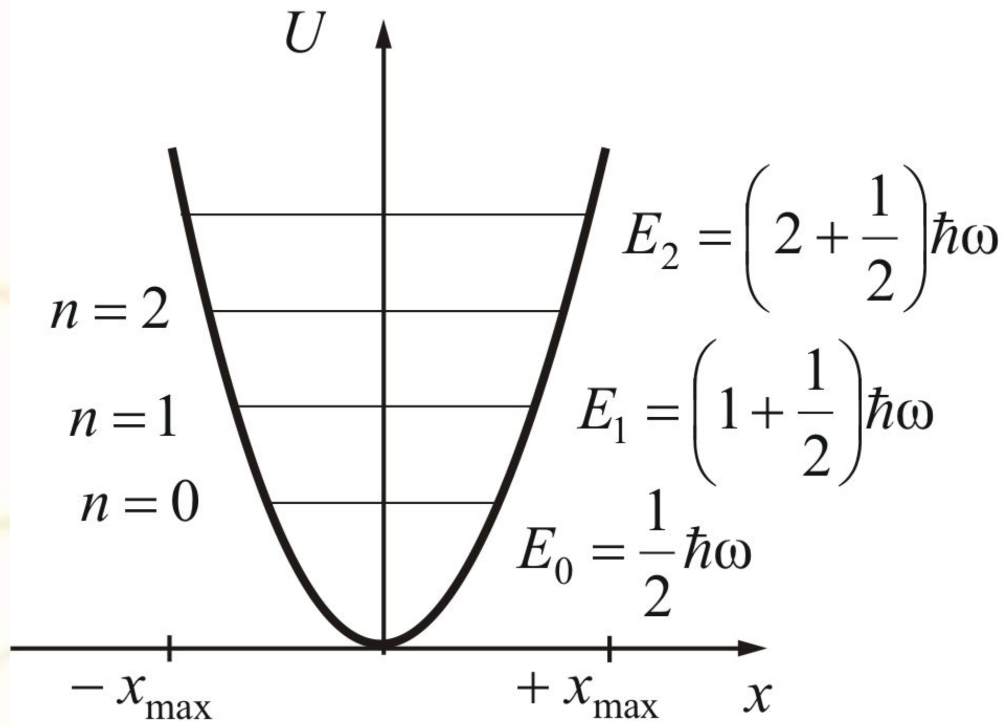
Значения ***полной энергии*** осциллятора

$$E_n=(n+1/2)\hbar\omega$$

где $n = 0, 1, 2\ldots$

x

$\Delta E_n = \hbar\omega$ ***и не зависит от*** n.



Минимальная энергия

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

называется нулевой энергией, т.е. ***при*** $T = 0K$ ***колебания атомов в кристаллической решетке не прекращаются.***

Это означает что частица не может находиться на дне потенциальной ямы.

x

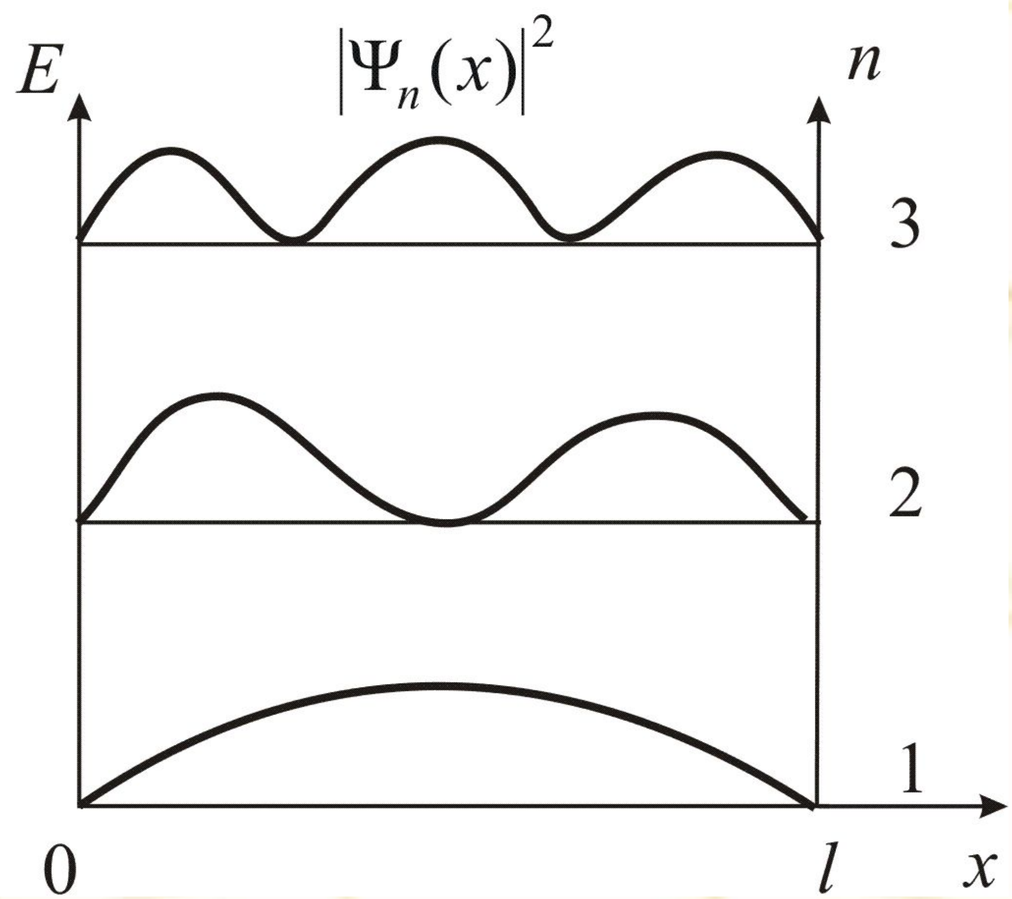
В квантовой механике вычисляется вероятность различных переходов квантовой системы из одного состояния в другое. Для гармонического осциллятора возможны лишь переходы между соседними уровнями.

Условия, накладываемые на изменения квантовых чисел при переходах системы из одного состояния в другое, называются ***правилами отбора*****:**

$$\Delta n = \pm 1$$

x

Плотность вероятности нахождения частицы $|\Psi|^2=\Psi\cdot\Psi^*$



При ***n = 2*** в середине ямы частицы быть не может.

x

Таким образом, энергия гармонического осциллятора изменяется только порциями, т.е. квантуется

$$E_n = n\hbar\omega$$

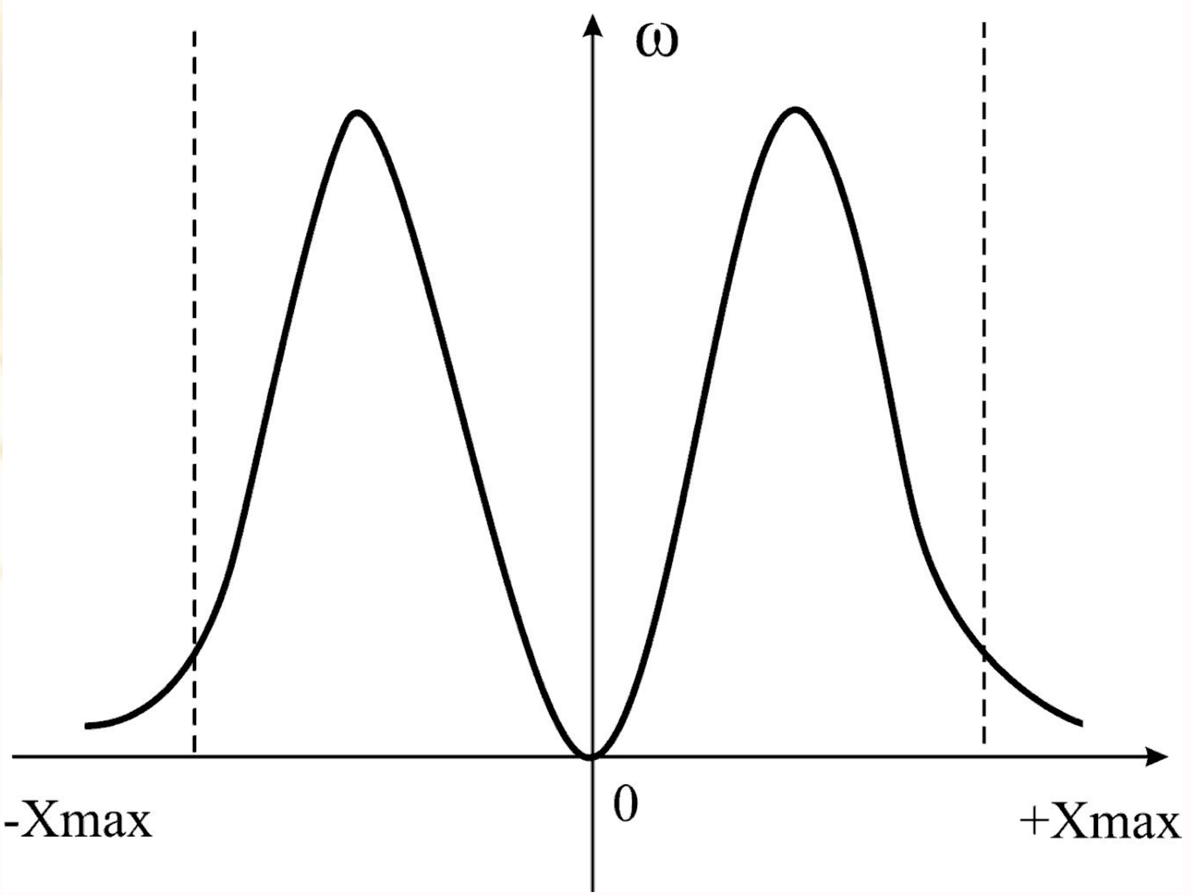
Причем ***минимальная порция энергии*** $E_0 = \dfrac{1}{2}\hbar\omega$

(Вспомним тепловые излучения, где энергия излучается квантами).

Кроме того например, при $n = 2$ в середине сосуда частицы быть не может. Это совершенно непонятно с классической точки зрения.

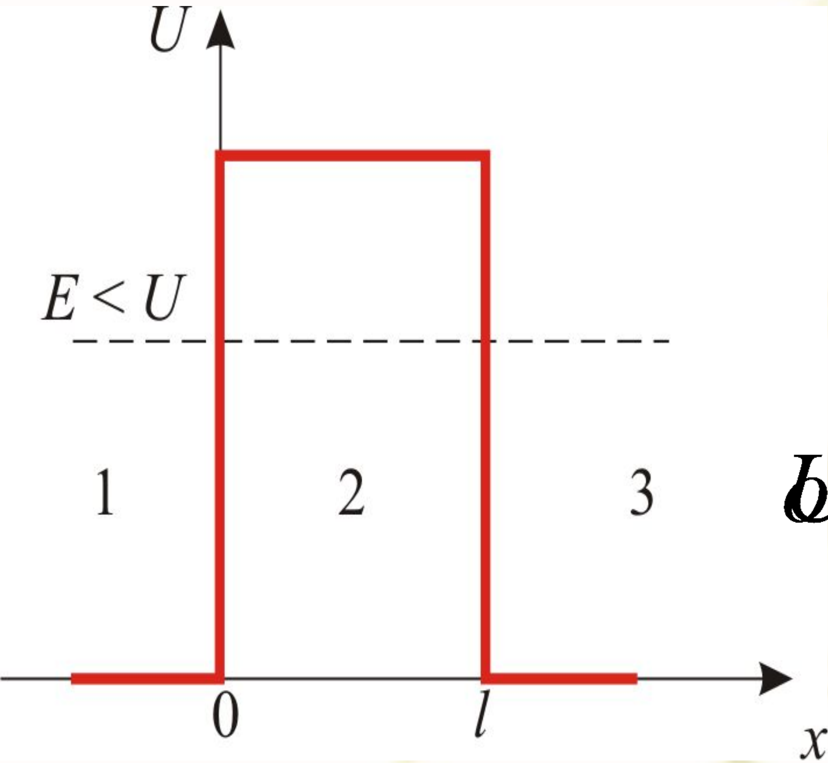
Квантуется не только энергия, но и координата частицы!

Кроме того, ***квантово – механический расчет показывает, что частицу можно обнаружить и за пределами ямы, т.е. в области с координатами*** $-x_0$ ***и*** $+x_0$, в то время как с классической точки зрения она не может выйти за пределы этой ямы.



x

4. Прохождение частиц сквозь потенциальный барьер. Туннельный эффект



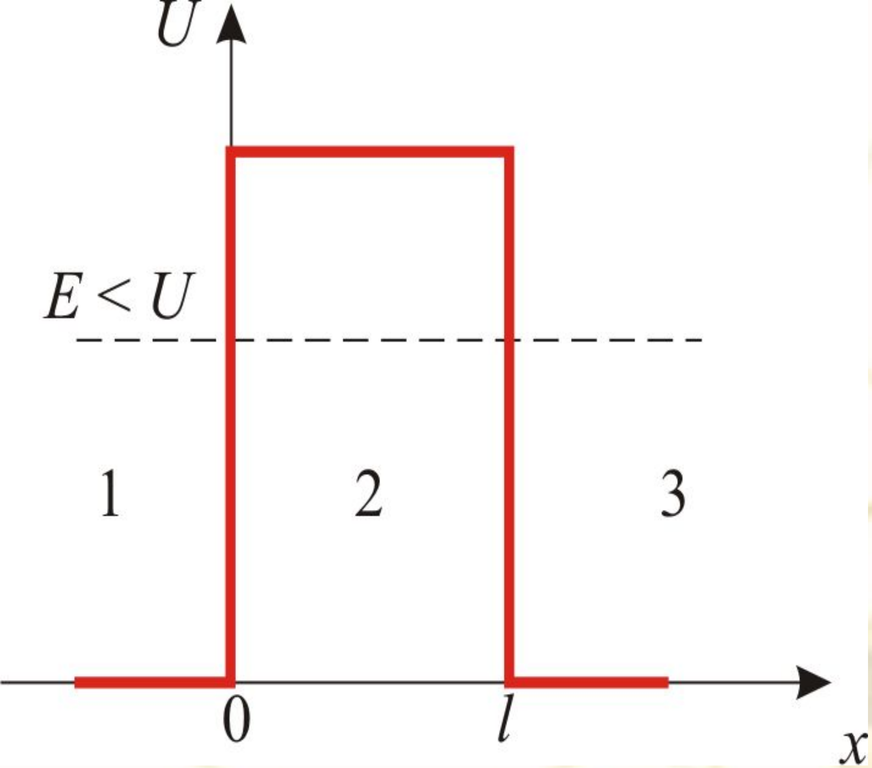
Рассмотрим простейший потенциальный барьер прямоугольной формы высоты U и шириной l для одномерного (по оси x) движения частицы.

$$U(x)=\begin{cases}0,\ x<0 & 1.\\ U,\ 0<x<l & 2.\\ 0,\ x>l & 3.\end{cases}$$

При данных условиях задачи ***классическая частица, обладая энергией E:***

либо беспрепятственно пройдет под барьером,

либо отразится от него ($E < U$) и будет двигаться в обратную сторону, т.е. она не может проникнуть через барьер.



Для микрочастицы же, даже при ***E > U***, ***имеется отличная от нуля возможность, что частица отразится от барьера и будет двигаться в обратную сторону.***

При ***E < U*** ***имеется также отличная от нуля вероятность, что*** частица окажется в области $x > l$, т.е. проникнет сквозь барьер.

Такой вывод следует непосредственно из решения уравнения Шредингера, описывающего движение микрочастицы при данных условиях задачи.

x

Уравнение Шредингера для состояний для каждой их выделенных областей имеет вид:

$$\frac{\partial^2 \Psi_{1,3}}{\partial x^2} + k^2 \Psi_{1,3} = 0 \qquad \left(для\, 1,3\, обл.\; k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \right)$$

$$\frac{\partial^2 \Psi_2}{\partial x^2} + q^2 \Psi_2 = 0 \qquad \left(для\, 2\; обл. \quad q^2 = \frac{2m(E-U)}{\hbar^2} \right)$$

Здесь $\boldsymbol{q = i\beta}$ – *мнимое число*, $\beta = \frac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar}$.

Общее решение этих дифф. уравнений:

$$\Psi_1(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} \quad (1)$$

$$\Psi_2(x) = A_2 e^{ikx} + B_2 e^{-ikx} \quad (2)$$

$$\Psi_3(x) = A_3 e^{ikx} + B_3 e^{-ikx} \quad (3)$$

x

Учитывая значение ***q*** и то, что $A_1 = 1$, $B_3 = 0$, получим ***решение уравнения Шредингера*** для ***трех областей*** в следующем виде:

$$\Psi_1(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} \quad (1)$$

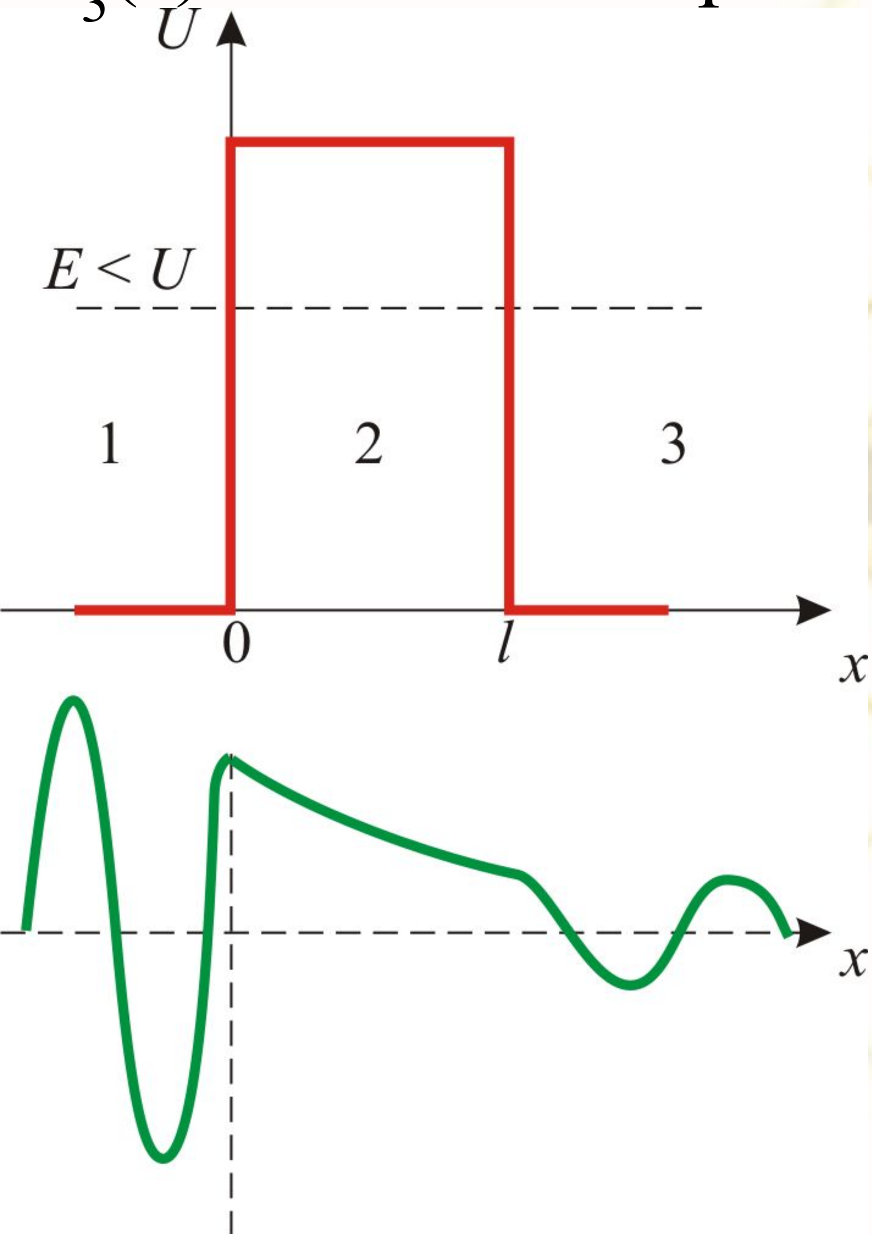
$$\Psi_2(x) = A_2 e^{-\beta x} + B_2 e^{\beta x} \quad (2)$$

$$\Psi_3(x) = A_3 e^{ikx} \quad (3)$$

В области 2 функция уже не соответствует плоским волнам, распространяющимся в обе стороны, поскольку показатели степени не мнимые а действительные

x

Качественный анализ функций $\Psi_1(x)$, $\Psi_2(x)$, $\Psi_3(x)$ показан на рис.



1. ***В области 1 плоская волна де Бройля.***

2. ***Волновая функция не равна нулю и внутри барьера,*** хотя уже не соответствует плоским волнам де Бройля

3. ***В области*** 3, если барьер не очень широк, ***будет*** опять ***иметь вид волн де Бройля с тем же импульсом, т.е. с той же частотой, но с меньшей амплитудой.***

Таким образом, ***квантовая механика приводит к принципиально новому квантовому явлению -***

туннельному эффекту,

в результате которого микрообъект может пройти через барьер.

x

Коэффициент прозрачности для барьера прямоугольной формы

$$\boxed{D = D_0 exp\left(-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U-E)}l\right)}$$

Для барьера произвольной формы

$$D = D_0 exp\left(-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2m(U-E)}l\,\mathrm{d}x\right)$$

x

Прохождение частицы сквозь ,барьер ***можно пояснить соотношением неопределенностей***: Неопределенность импульса на отрезке $\Delta x = l$ составляет

$$\Delta p > \frac{h}{l}.$$

Связанная с этим разбросом в значении импульса

кинетическая энергия $K = \dfrac{\Delta p^2}{2m}$

может оказаться достаточной для того, чтобы полная энергия оказалась больше потенциальной.

С классической точки зрения прохождение частицы сквозь потенциальный барьер при $E < U$ ***невозможно***, так как частица, находясь в области барьера, должна была бы обладать отрицательной кинетической энергией.

Туннельный эффект является ***специфическим квантовым эффектом***.

Основы теории туннельных переходов заложены работами ***советских ученых Л.И. Мандельштама и М.А. Леонтовича в 1928 г.***

Туннельное прохождение сквозь потенциальный барьер лежит в ***основе многих явлений:***

- физики твердого тела (например, явления в контактном слое на границе двух полупроводников),
- атомной и ядерной физики (например, α-распад, протекание термоядерных реакций).