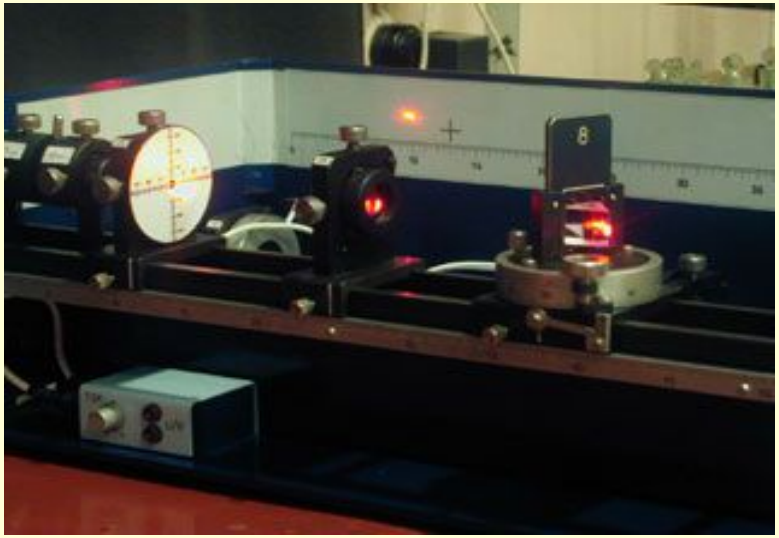
Оптика и квантовая физика

для студентов

2 курса ФТФ и ГГФ



Кафедра общей физики

Лекция 9

Квантовая механика

- Волновая функция.
- Уравнение Шредингера
- Стационарное уравнение Шредингера
- Квантовая частица в одномерной бесконечно глубокой потенциальной яме
- Одномерный потенциальный порог и барьер

Волновая функция

В квантовой механике *волновой функцией* называют волну де Бройля

$$\Psi = Ae^{-i(\omega t - \vec{k}\vec{r})}$$

- для свободной частицы

Если Ψ- функция описывает ансамбль, состоящий из большого числа частиц, то величина $|\Psi|^2$ в любой точке пропорциональна числу частиц, которые будут обнаружены в малой окрестности данной точки.

Если волновая функция Ψ описывает отдельную частицу (например, электрон в атоме), то $|\Psi|^2$ интерпретируется следующим образом: *вероятность dw(x,y,z,t) того, что частица в момент времени t находится в элементе объема dV=dx.dy.dz, выбранном вблизи точки с координатами x, y, z, пропорциональна /Ψ(x,y,z,t)/ ^{2} и объему, т.е.*

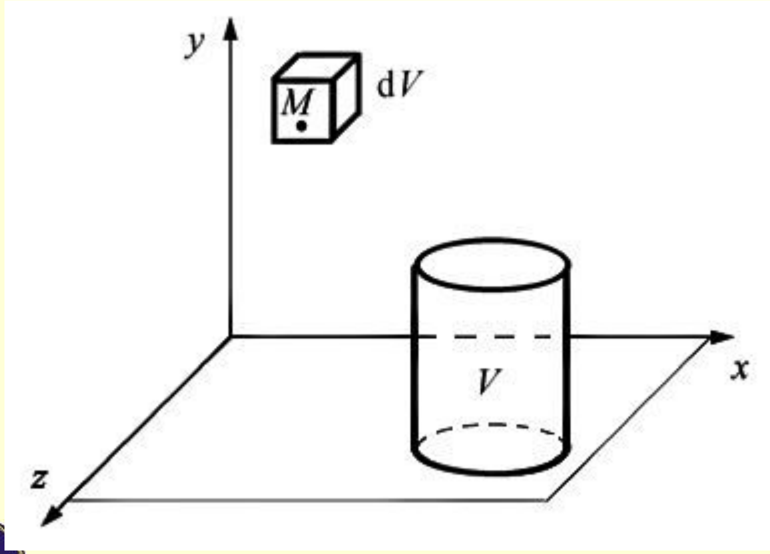
$$dw = \left|\Psi\right|^2 dV$$

Волновая функция

Физический смысл имеет не сама волновая функция Ψ, а квадрат модуля ее амплитуды $|\Psi|^2 = \Psi\,\Psi^*$ – интенсивность волны де Бройля, равная *плотности вероятности* ***ω****,* т.е. вероятности пребывания частицы в окрестности данной точки М в данный момент времени.

Волновая функция Ψ − основная характеристика состояния микрообъектов (элементарных частиц, атомов, молекул).

$$w = \frac{\mathrm{d}P}{\mathrm{d}V} = |\Psi|^2$$



dP - вероятность того, что для заданного квантового состояния частицы в некоторый момент времени мы обнаружим частицу в элементарном объеме dV, окружающем точку М.

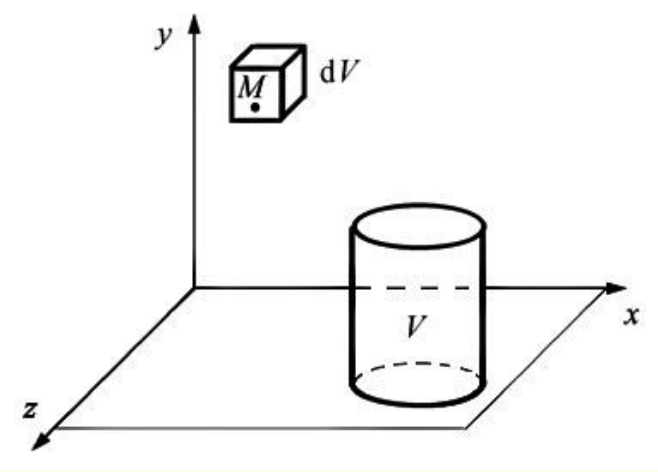
Волновая функция

Вероятность P того, что частица будет обнаружена в любой области пространства конечного объема:

$$P = \int \mathrm{d}P = \int_V w\,\mathrm{d}V$$

$$w = \frac{\mathrm{d}P}{\mathrm{d}V} = |\Psi|^2$$

$$P = \int_V |\Psi|^2\,\mathrm{d}V$$ или $$P = \int_V \Psi^*\Psi\,\mathrm{d}V$$



Уравнение Шредингера 1926 г.

Основное уравнение нерелятивистской квантовой механики, справедливо только в случае движения частиц со скоростями, много меньшими скорости света в вакууме. Уравнение постулируется.

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

- общее (временное) уравнение Шредингера

m *− масса микрочастицы,*

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

− оператор Лапласа

U(x,y,z,t) *− функция координат и времени, описывающая воздействие на частицу силовых полей (в стационарном случае U(x,y,z) − потенциальная энергия частицы)*

Уравнение Шредингера

В общем случае в задачах квантовой механики дифференциальное уравнение Шредингера в частных производных должно решаться с учетом определенных начальных и граничных условий на волновую функцию.

Начальное условие задает значение волновой функции в начальный момент времени.

Граничные условия являются следствием регулярности волновой функции, обеспечивая, в частности, ее непрерывность. Эти условия формулируются на границах областей, где потенциальная функция терпит разрывы первого или второго рода. Сюда же относятся условия на волновую функцию в бесконечно удаленных точках пространства, которые обеспечивают выполнение условия нормировки:

$$\int_{V\to\infty} |\Psi|^2 \,\mathrm{d}V = 1 \quad \text{или} \quad \int_{\Re^N} \Psi^* \Psi \,\mathrm{d}V = 1$$

Уравнение Шредингера

Дополнительные условия, накладываемые на функцию Ψ:

1) Ψ − конечная, непрерывная и однозначная;

2) производные от Ψ по *x, y, z, t* непрерывны (в отсутствии бесконечного скачка функции *U(x,y,z,t))*;

3) функция $|\Psi|^2$ должна быть интегрируема, т.е. интеграл

$$\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}|\Psi|^2 dx\, dy\, dz$$

должен быть конечным.

Уравнение Шредингера. Стационарное решение

Если все наблюдаемые физические параметры стационарны, т.е. не зависят от времени, в частности *U=U(x, y, z).*

Решение уравнения Шредингера может быть представлено в виде

$$\Psi(x,y,z,t) = \psi(x,y,z)\, e^{-i\omega t}$$

где частота ω постоянна, а функция ψ *(x,y,z)* не зависит от времени.

$$\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + \left[E - U(x,y,z)\right]\psi = 0$$

- стационарное уравнение Шредингера

E - полная энергия частицы.

Функции ψ, удовлетворяющие стационарному уравнению Шредингера при данном значении потенциальной энергии частицы *U(x,y,z),* называются *собственными функциями.*

Значения *E,* при которых существуют решения уравнения, называются *собственными значениями.*

Совокупность собственных значений называется их спектром. Спектр может быть *дискретный* или *сплошной*.

Примеры решения простейших квантово-механических задач

1. Движение свободной частицы

$$\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + \left[E - U(x,y,z)\right]\psi = 0$$

Частица движется вдоль оси *x* с постоянной скоростью *V* в отсутствии силовых полей, т.е. *U(x, y, z)≡0, E = E кин.*

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi = 0$$

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

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + k^2\psi = 0$$

$$\psi(x) = A_0 \cos kx$$ - частное решение

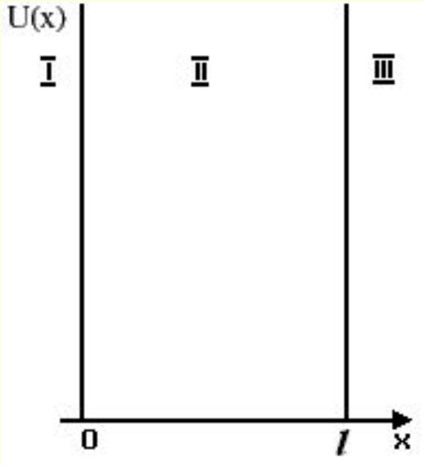
$$\psi(x) = A_0 e^{ikx} + B_0 e^{-ikx}$$ - общее решение

$$\Psi(x,y,z,t) = \psi(x,y,z)\, e^{-i\omega t}$$

$$\Psi(x,t) = A_0 e^{-i(\omega t - kx)} + B_0 e^{-i(\omega t + kx)}$$

Плотность вероятности обнаружения частицы не зависит от времени и в любой точке пространства одинакова.

2. Частица в бесконечно глубокой одномерной потенциальной яме



Потенциальная энергия частицы принимает значения:

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

Частица, находящаяся в “яме”, за пределы ямы попасть не может → за ее пределами ψ*(x)≡0.*

Из условия непрерывности волновой функции следует, что на границах “ямы”

$$\psi(0)=\psi(l)=0 \quad (1)$$

стационарное уравнение Шредингера

$$\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi+\left[E-U(x,y,z)\right]\psi=0 \rightarrow \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}E\psi=0$$

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

Решение уравнения

$$\psi(x)=A\sin(kx+\alpha)$$

2. Частица в бесконечно глубокой одномерной потенциальной яме

Расстояние между соседними уровнями энергии

$$\Delta E_n = \frac{\pi^2 h^2}{2ml^2}(2n+1) \cong \frac{\pi^2 h^2}{ml^2} n$$

для больших *n*

$$\frac{\Delta E_n}{E_n} = \frac{2n+1}{n^2}.$$

Для массивных частиц и для больших l (например, молекулы в сосуде) уровни энергии будут практически сливаться, однако при малых n и l (электроны в атоме) ΔE_n сравнимо с величиной E_n.

2. Частица в бесконечно глубокой одномерной потенциальной яме

$$\boxed{\psi(x) = A\sin(kx + \alpha)} \qquad (2)$$

Из граничных условий (1) $\longrightarrow \alpha = 0,\ \sin(kl) = 0 \longrightarrow kl = \pm n\pi\ (n = 1, 2, \ldots)$

$$\boxed{\frac{2m}{\hbar^2}E = \frac{n^2\pi^2}{l^2}} \qquad \boxed{E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}n^2}$$

энергия частицы в яме может принимать только дискретные значения

n – квантовое число,

E_n – уровень энергии.

Состояние частицы с наименьшей энергией (n =1) – основное состояние.

Все остальные состояния – возбужденные: n = 2 – первое возбужденное состоянию, n =3 – второе возбужденное состояние и т.д.

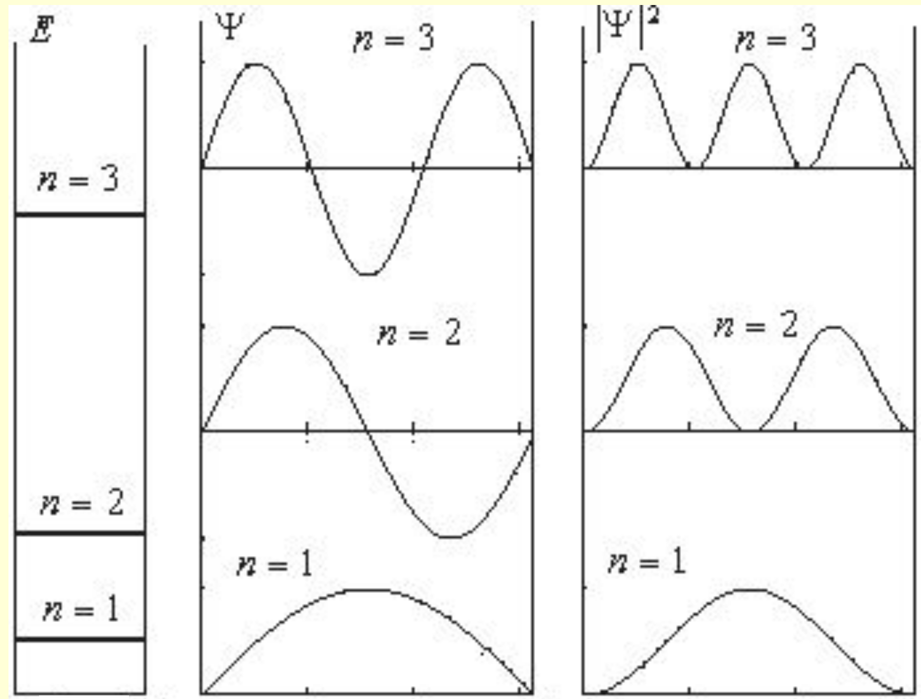
2. Частица в бесконечно глубокой одномерной потенциальной яме

$$\psi(x) = A\sin(kx + \alpha) \qquad (2)$$

Коэффициент *A* находится из условия нормировки (частица обязательно должна находиться внутри потенциальной ямы, следовательно, вероятность нахождения её в “яме” равна единице)

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^2(x)\,dx = 1 \qquad A^2 \int_0^l \sin^2 \frac{n\pi x}{l}\,dx = 1$$

$$A = \sqrt{\frac{2}{l}} \qquad \psi(x) = \sqrt{\frac{2}{l}}\,\sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right)$$



Уровни энергии, волновые функции, распределение плотности вероятности по координате x

на ширине “ямы” l должно укладываться целое число полуволн де Бройля свободной частицы с энергией $E = E_n$

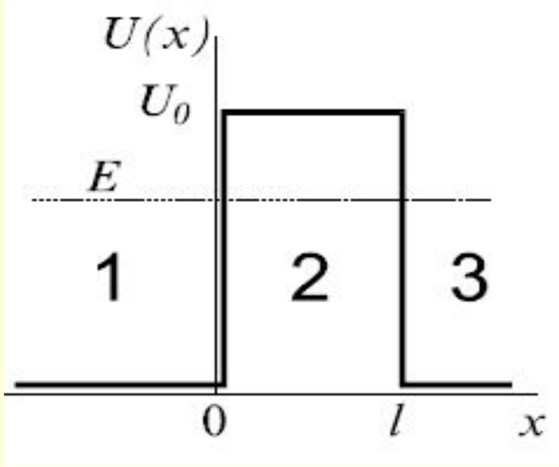
http://www.teachmen.ru/work/lectureS

2. Частица в бесконечно глубокой одномерной потенциальной яме

Подведем итоги:

- энергия основного состояния частицы не равна нулю;
- энергия частицы квантована и значение ее пропорционально n^2;
- вероятность обнаружить частицу меняется от точки к точке;
- если значение квантового числа n устремить к бесконечности, решение переходит в классическое.

3. Прохождение частицы сквозь потенциальный барьер

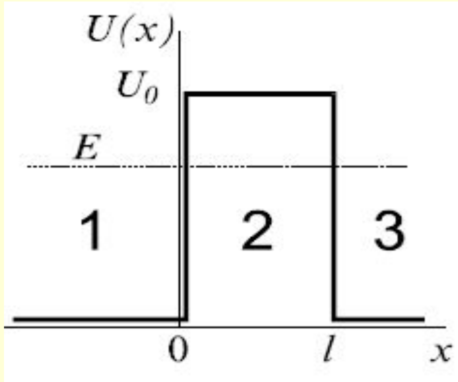


Пусть частица, движущаяся слева направо, встречает на своем пути потенциальный барьер высоты U_0 и ширины *l.*

Согласно **квантовой механике** при $E > U_0$ существует отличная от нуля вероятность того, что частица “отразится” от барьера, а при $E < U_0$ существует отличная от нуля вероятность того, что частица проникнет “сквозь” барьер и окажется в области $x > l$.

Согласно законам **классической физики**, если энергия частицы больше высоты барьера ($E>U_0$), то частица беспрепятственно проходит “над барьером”, на участке $0 \le x \le l$ лишь уменьшается её кинетическая энергия. Если энергия частицы меньше высоты барьера ($E < U_0$), то частица “отражается” от барьера и летит в обратную сторону.

3. Прохождение частицы сквозь потенциальный барьер



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

Ограничимся случаем $E<U_0$.

$$\frac{\partial^2\psi_{1,3}}{\partial x^2}+k^2\psi_{1,3}=0 \quad \text{(для областей } 1 \text{ и } 3 \quad k^2=2mE/\hbar^2\text{)},$$

$$\frac{\partial^2\psi_2}{\partial x^2}+q^2\psi_2=0 \quad \text{(для области } 2 \quad q^2=2m(E-U)/\hbar^2\text{)}.$$

Решения

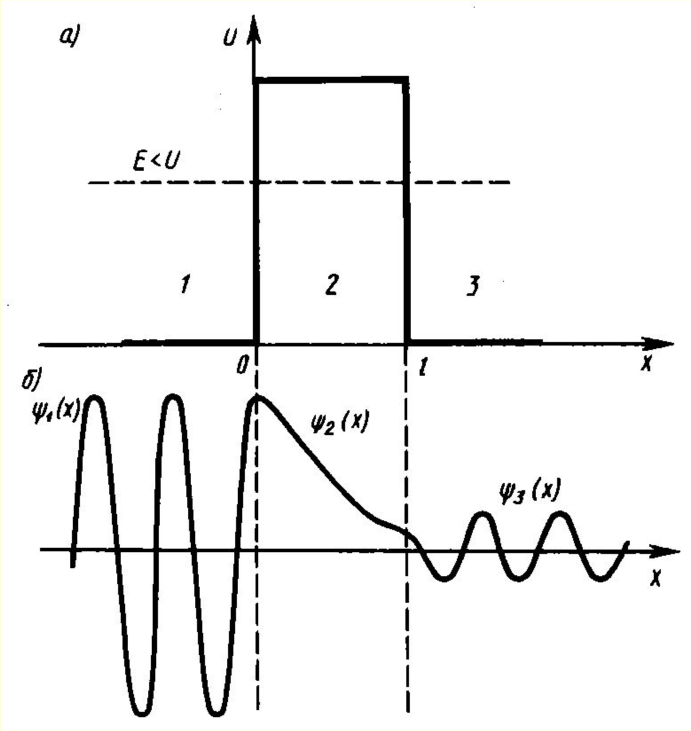
$$\psi_1(x)=A_1e^{ikx}+B_1e^{-ikx} \quad \text{(для области } 1\text{)},$$

$$\psi_2(x)=A_2e^{-\beta x}+B_2e^{\beta x} \quad \text{(для области } 2\text{)},$$

$$\psi_3(x)=A_3e^{ikx} \quad \text{(для области } 3\text{)}.$$

$$\beta=\sqrt{2m(U-E)}/\hbar.$$

3. Прохождение частицы сквозь потенциальный барьер



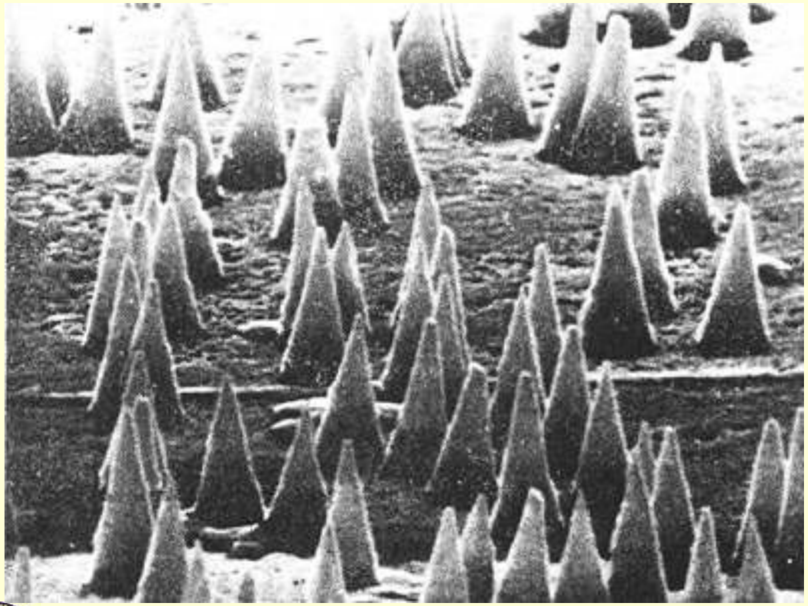
Амплитуда волны де Бройля в области 3 отлична от нуля. Это означает, что существует отличная от нуля вероятность того, что частица проникает сквозь барьер.

Явление проникновения частиц сквозь потенциальный барьер - ***туннельный эффект*** (частица как бы проходит по туннелю через классически запрещенную область). При прохождении через барьер полная энергия частицы не меняется

Туннельным эффектом объясняются многие физические явления − контактная разность потенциалов и холодная эмиссия электронов из металлов, многие явления ядерной физики. Туннельный эффект используется в некоторых приборах радиоэлектроники (туннельный диод) и в измерительной технике (туннельный микроскоп).

3. Прохождение частицы сквозь потенциальный барьер

Холодная эмиссия электронов находит широкое применение при изучении физических свойств поверхностей, адсорбции газов, явлений катализа и коррозии. Эмиттеры с холодной эмиссией (автоэлектронные эмиттеры) используются в технике, особенно в тех случаях, когда необходимо получить высокую плотность тока . Для того, чтобы создать большую напряженность электрического поля вблизи поверхности металла, автоэлектронные эмиттеры делают в виде поверхностей с малым радиусом кривизны: в виде острия, лезвия, торца нити и т.д.



Электронная микрофотография эмиттера с многоострийной поверхностью, полученного отечественными учеными из Объединенного института ядерных исследований (г. Дубна).
По форме острия представляют собой конусы высотой 6,6 мкм и диаметром основания 1,5 мкм. Средний радиус кривизны вершины конусов 0,1 мкм