УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

В 1926 г. швейцарский теоретик Эрвин Шредингер открыл фундаментальное уравнение, которому волны де Бройля удовлетворяют во всех случаях.

Для частицы, движущейся в силовом поле:

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

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} -$$ **оператор Лапласа**

$U(x, y, z, t) -$ **потенциальная энергия частицы в силовом поле**

Если пси-функция не зависит от времени, то состояние частицы называют стационарным.

Для этого состояния:

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

ψ – волновая функция стационарного состояния

W – полная энергия частицы

Волновая функция должна быть конечной, однозначной, непрерывной, интегрируемой и подчиняться условию нормировки

$$\int_V |\psi|^2 dV = 1.$$

Уравнение Шредингера имеет решение только при некоторых значениях энергии W. Эти значения называют собственными значениями энергии.

Соответствующие волновые функции называют собственными функциями.

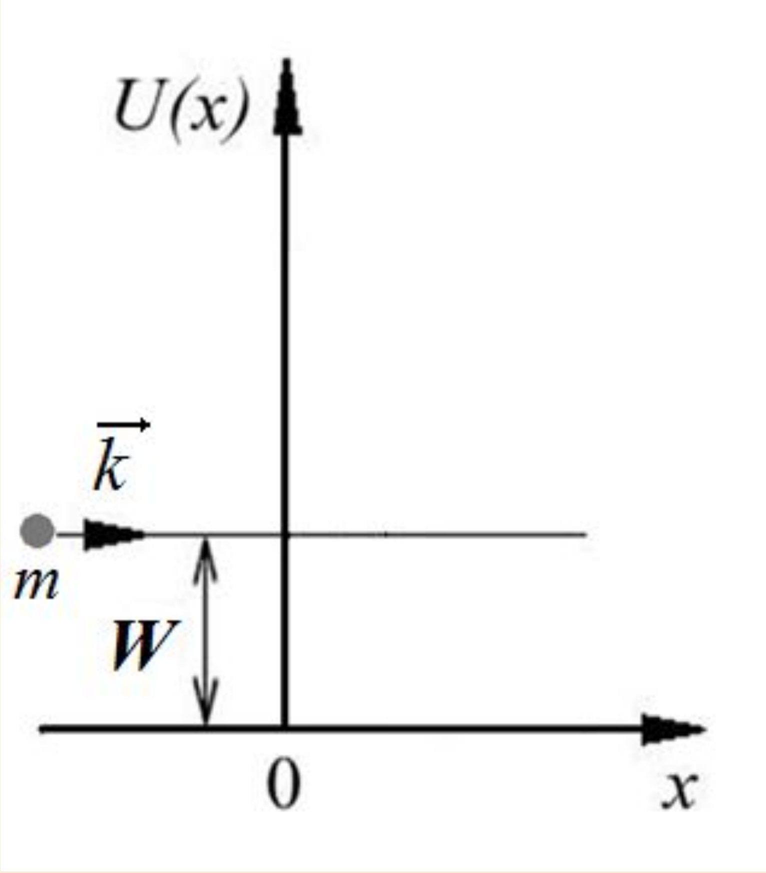
Чтобы решить уравнение Шредингера, надо задать потенциальную энергию как функцию координат и граничные условия для волновой функции. Решение представляет из себя набор собственных значений энергии и собственных функций.

Уравнение Шредингера – это уравнение движения микрочастицы. Его роль та же, что и второго закона Ньютона в классической механике.

Принцип причинности в квантовой механике состоит в том, что зная волновую функцию в начальный момент времени, можно, применив уравнение Шредингера, найти ее в последующие моменты времени.

Движение свободной частицы

**Пусть частица движется вдоль оси x.
Для свободной частицы U=0. Тогда**



$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}W\psi(x)=0$$

или

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

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} W}$$

Получили обычную связь энергии и импульса нерелятивистской частицы:

$$W = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{p^2}{2m}$$

Решение уравнения имеет вид:

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

или

$$\psi(x) = A\sin kx + B\cos kx$$

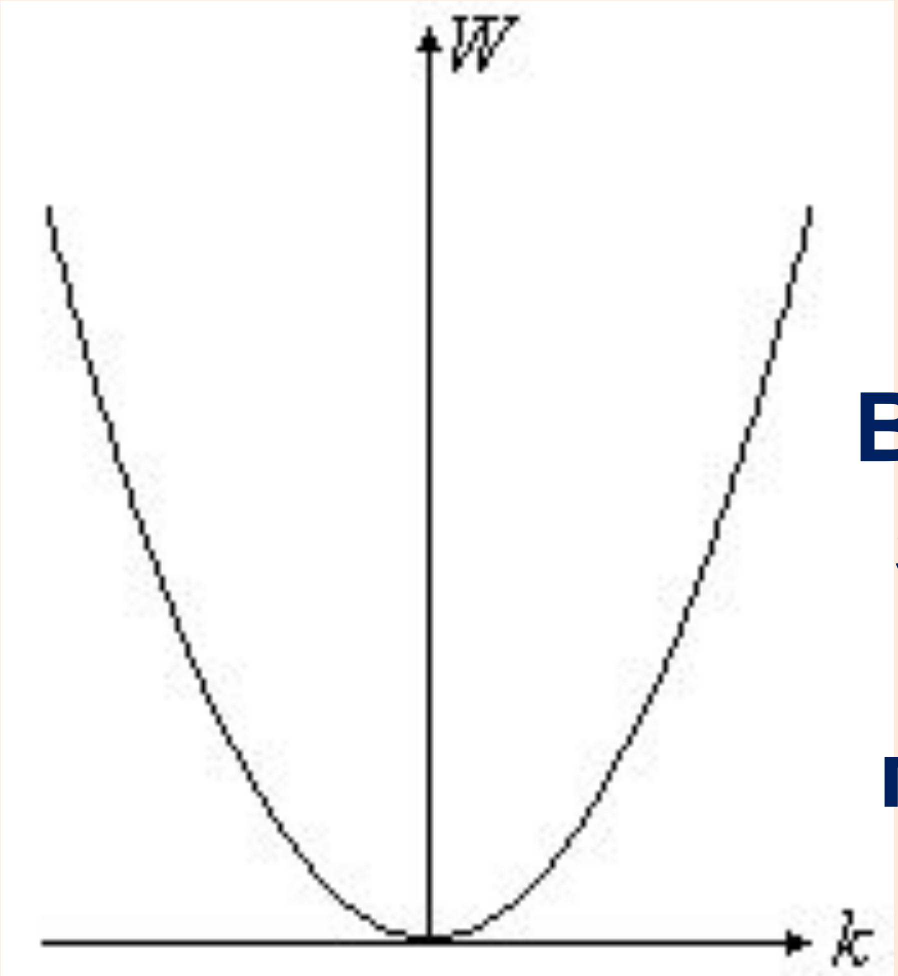
$A, B -$ константы интегрирования

С учетом зависимости пси-функции от времени

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

$$\Psi(x,t) = A\sin(\omega t - kx) + B\cos(\omega t - kx)$$

Для свободной частицы собственные функции уравнения Шредингера – это плоские монохроматические волны де Бройля произвольных частот.



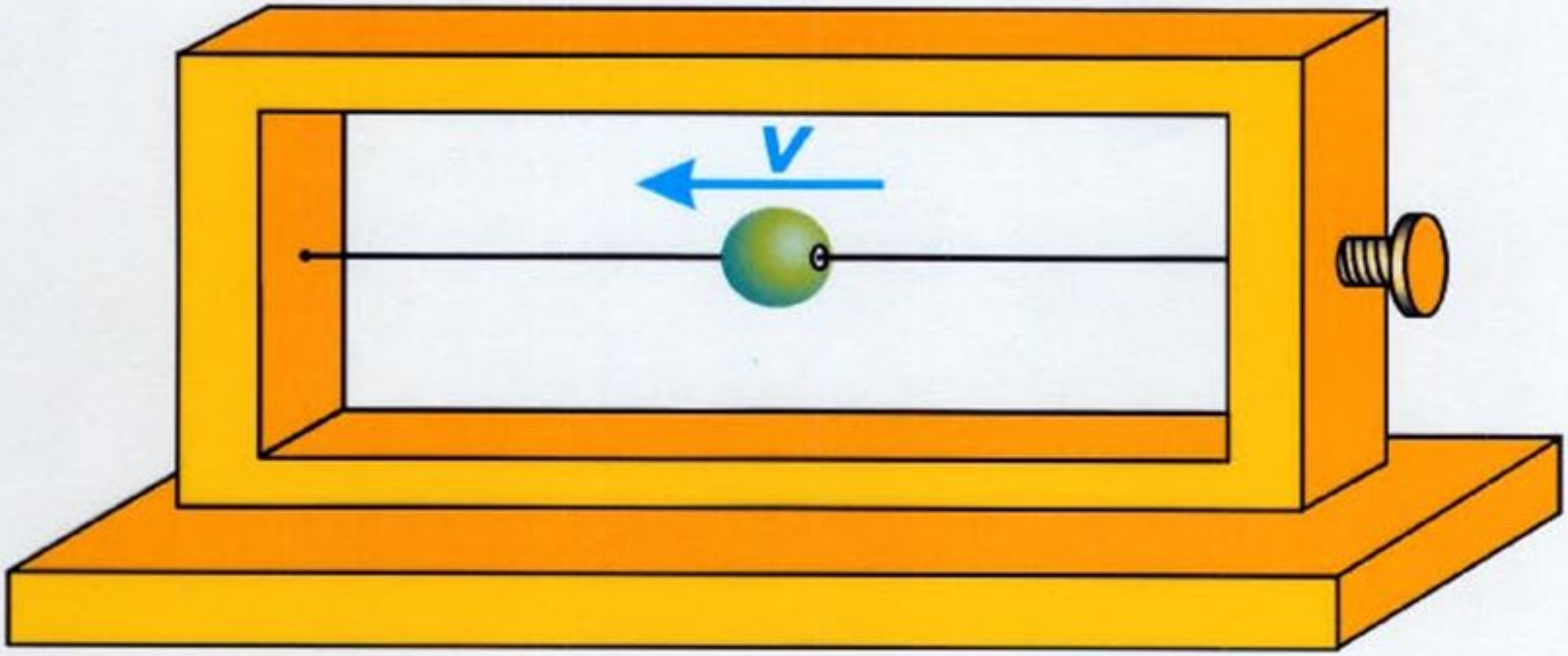
$$W = \frac{\hbar^2}{2m}k^2$$

Волновое число, а, значит, и энергия частицы могут принимать любое значение.

Энергетический спектр свободной частицы является сплошным.

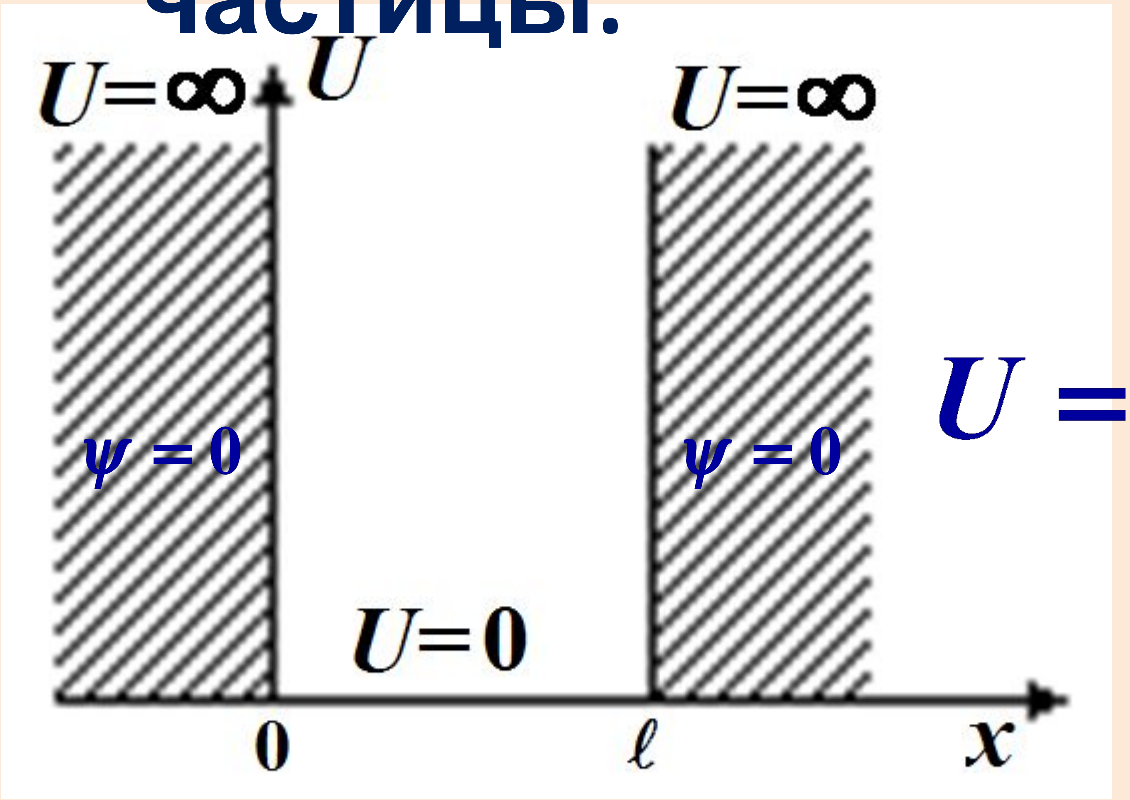
Частица в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками

Пример "классической" потенциальной ямы



В отсутствии трения и при условии абсолютно упругого удара о стойки величина скорости (энергия) шарика может иметь любые постоянные значения.

Потенциальная энергия частицы:



$$U = \begin{cases} \infty, & x \le 0 \\ 0, & 0 < x < \ell \\ \infty, & x \ge 0 \end{cases}$$

Снаружи и на краях ямы частица быть не может: ψ =0.

Внутри ямы:

$$\psi(x) = A\sin kx + B\cos kx$$

Граничные условия: $\psi(0)=0$, $\psi(\ell)=0$.

Тогда $B=0$, т.к. $\cos 0 \neq 0$, а

$$k = \frac{n\pi}{\ell}, \quad n = 1, 2, 3\ldots$$

Собственные функции

$$\psi_n(x) = \sin\frac{n\pi}{\ell}x$$

представляют собой стоячие волны де Бройля с узлами на краях ямы.

Собственные энергии

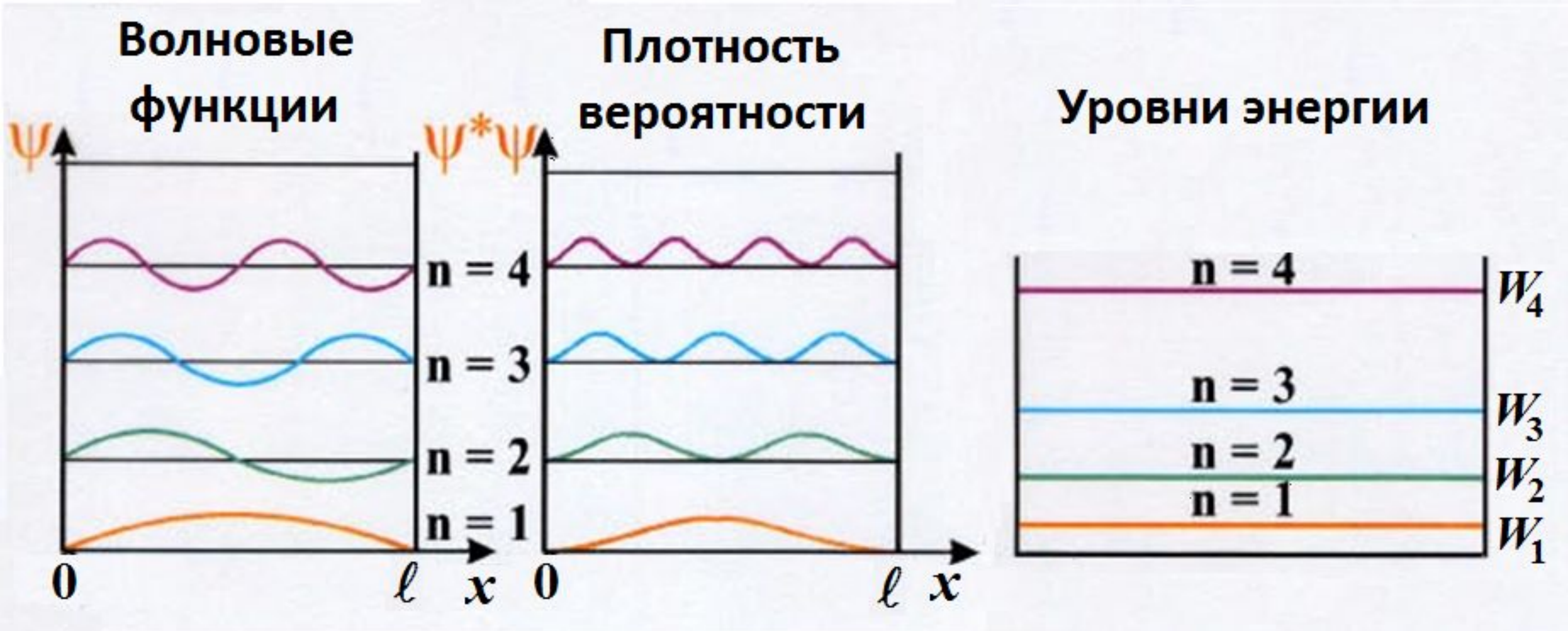
$$W_n = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m\ell^2}$$

Энергия принимает дискретные значения – квантуется.

W_n – **уровни энергии**,

n – **главное квантовое число.**

$$W_n = n^2 \cdot W_1$$



В зависимости от *n* частица “предпочитает” различные места в потенциальной яме

Расстояние между энергетическими уровнями:

$$\Delta W = W_{n+1} - W_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m\ell^2}(2n-1)$$

Относительное расстояние:

$$\frac{\Delta W}{W_n} = \frac{2n+1}{n^2}$$

При больших квантовых числах
$$\frac{\Delta W}{W_n} \approx \frac{2}{n} \ll 1$$

<u>Принцип соответствия Бора</u>:

в пределе при больших n законы квантовой механики переходят в законы классической физики. Энергетический спектр

Линейный гармонический осциллятор

Гармоническим осциллятором называют частицу массой *m*, совершающую движение под действием квазиупругой силы

$$F = -kx.$$

Потенциальная энергия такой частицы

$$U = \frac{kx^2}{2},$$

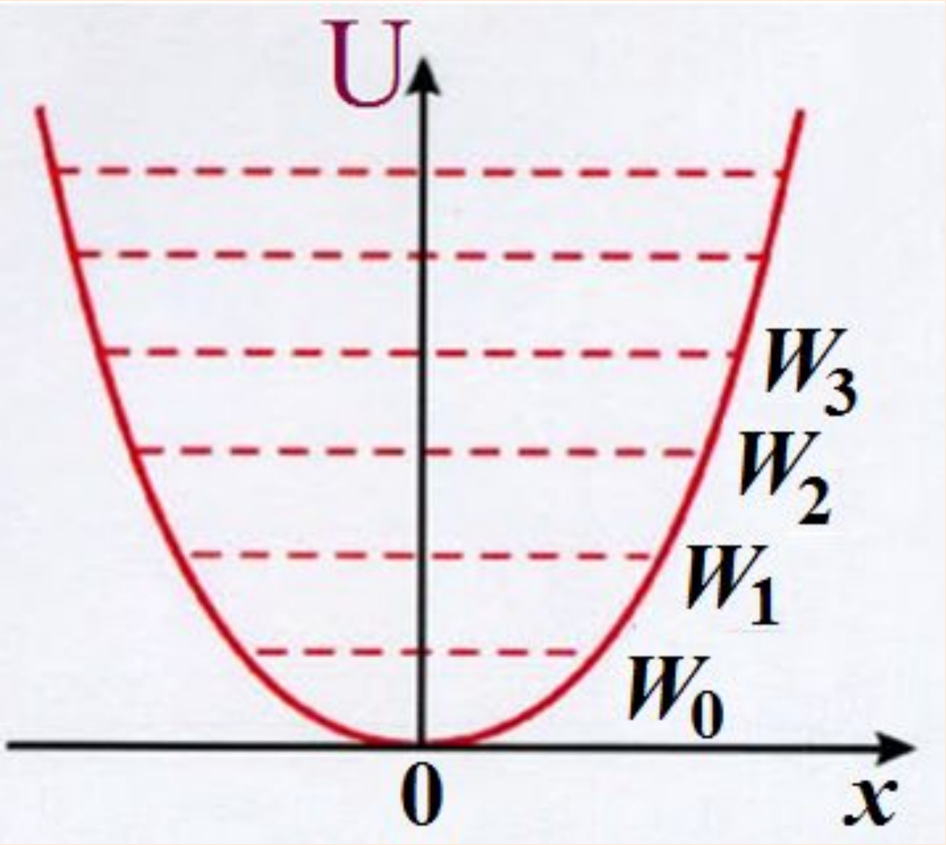
уравнение Шредингера

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(W - \frac{kx^2}{2}\right)\psi = 0.$$

Так как частица движется в ограниченной области пространства, энергетический спектр будет дискретным.

Собственные энергии:

$$W_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega, \quad n = 0, 1, 2, 3...$$



Уровни отделены друг от друга на одну и ту же энергию

$$\Delta W = \hbar\omega = h\nu .$$

Такой спектр называют <u>эквидистантным</u>.

Состояние с наименьшей энергией

$$W_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

называют основным.

Энергия квантового осциллятора не может обращаться в нуль.

Движение частицы в основном состоянии называют нулевыми колебаниями. Отличие от нуля минимальной энергии квантового гармонического осциллятора — это следствие соотношения неопределенностей Гейзенберга.

При переходе между состояниями выделяется или затрачивается энергия

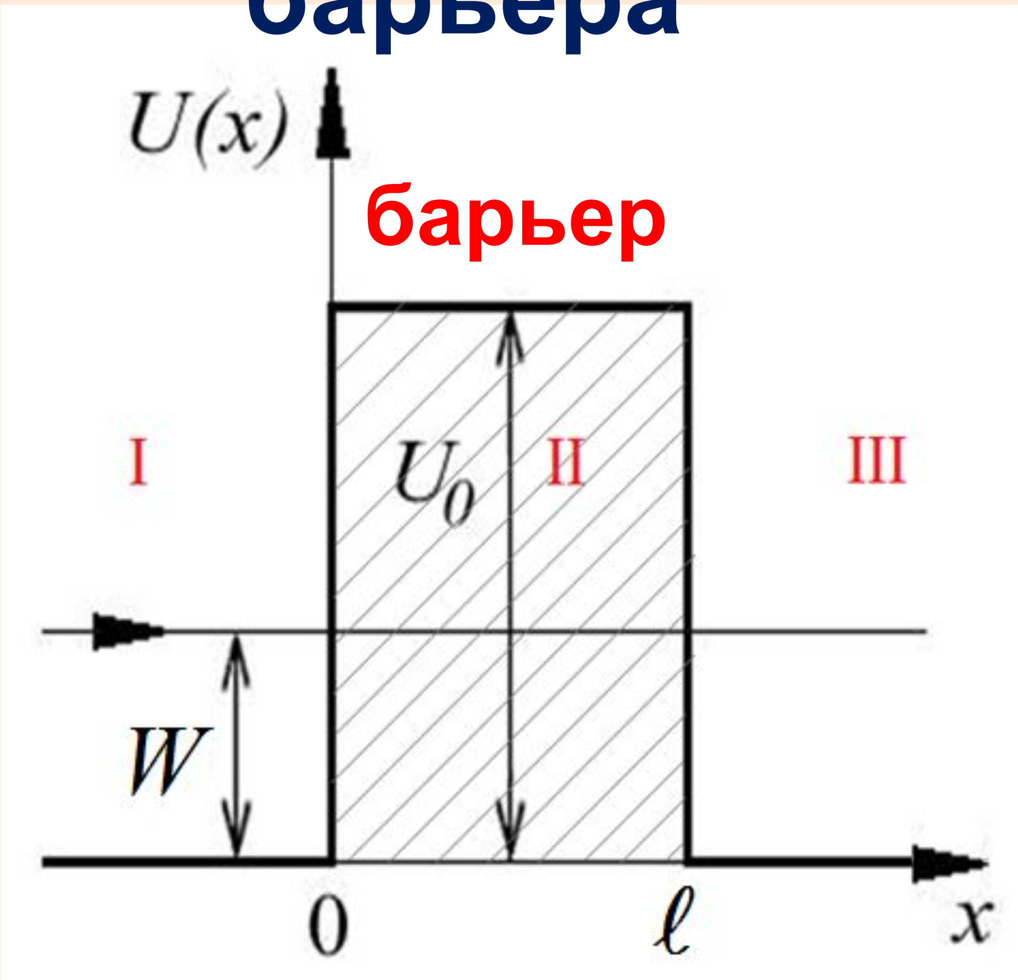
$$\Delta W = h\nu$$

в полном соответствии с гипотезой Планка.

Туннельный эффект

Туннельный эффект - это «просачивание» микрочастицы сквозь потенциальный барьер, т. е. проникновение в недоступную с классической точки зрения область пространства.

U_0 – высота барьера



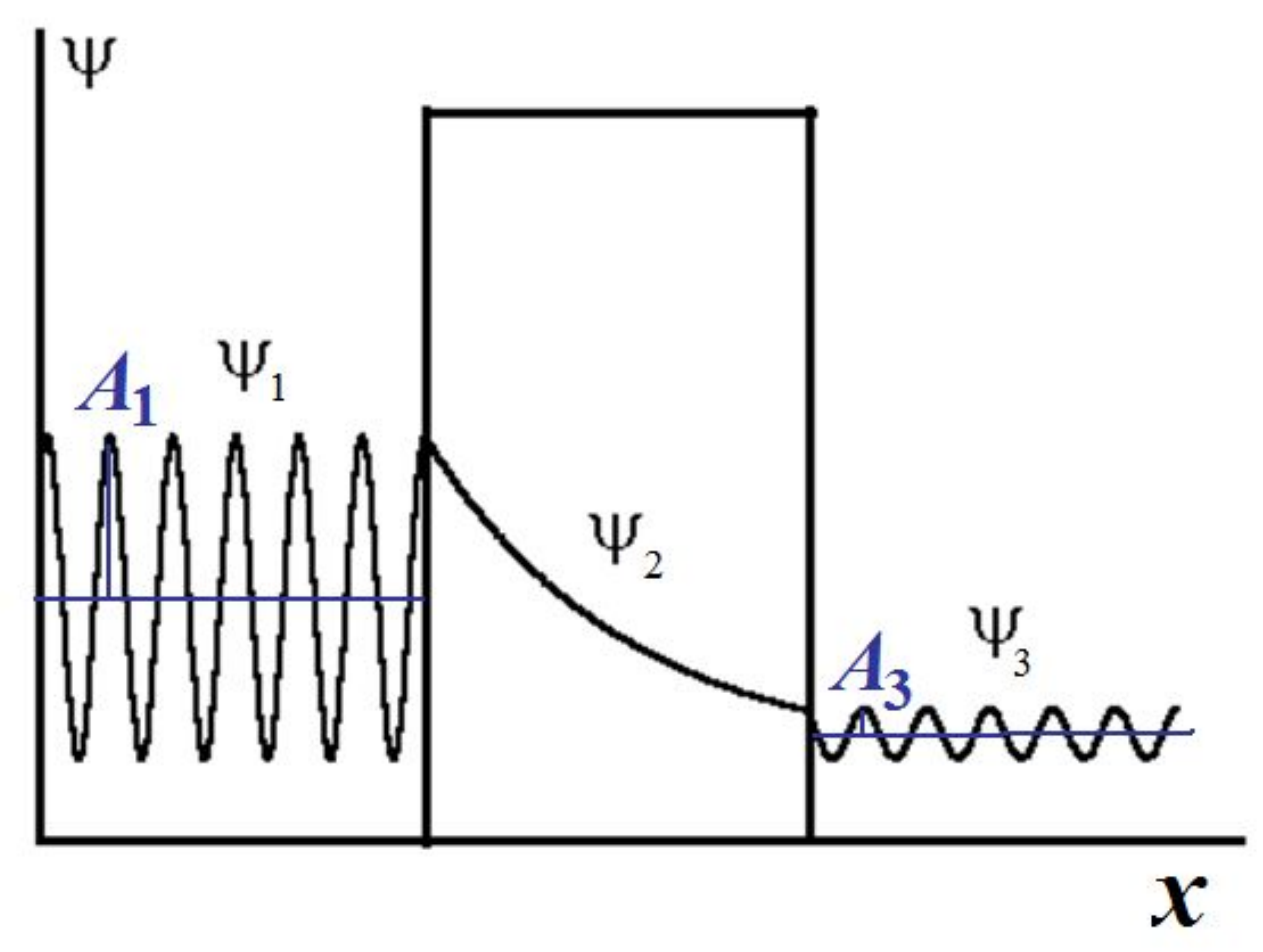
Полная энергия частицы

$W < U_0$.

В областях I и III частица движется свободно.

В областях I и III волновые функции – плоские волны де Бройля с амплитудами A_1 и A_3.

В области барьера волновая функция убывает с расстоянием.



Ψ
A_1
$Ψ_1$
$Ψ_2$
A_3
$Ψ_3$
x

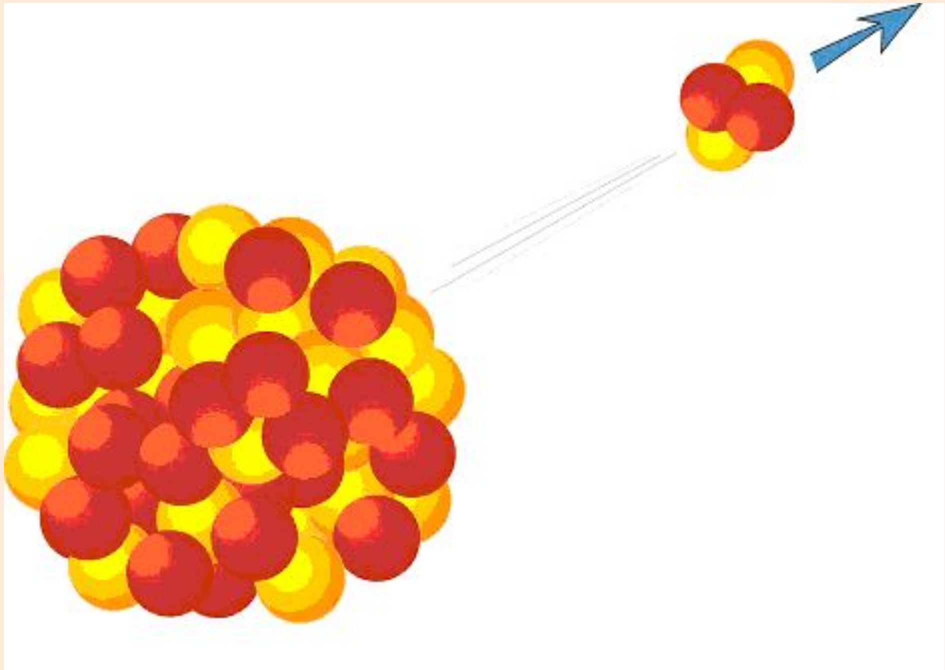
Отношение интенсивностей прошедшей и падающей волн дает вероятность прохождения барьера частицей.

$$D = \frac{A_3^2}{A_1^2} \approx e^{-\frac{2\ell}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - W)}}$$

Еще эту величину называют <u>прозрачностью барьера</u>.

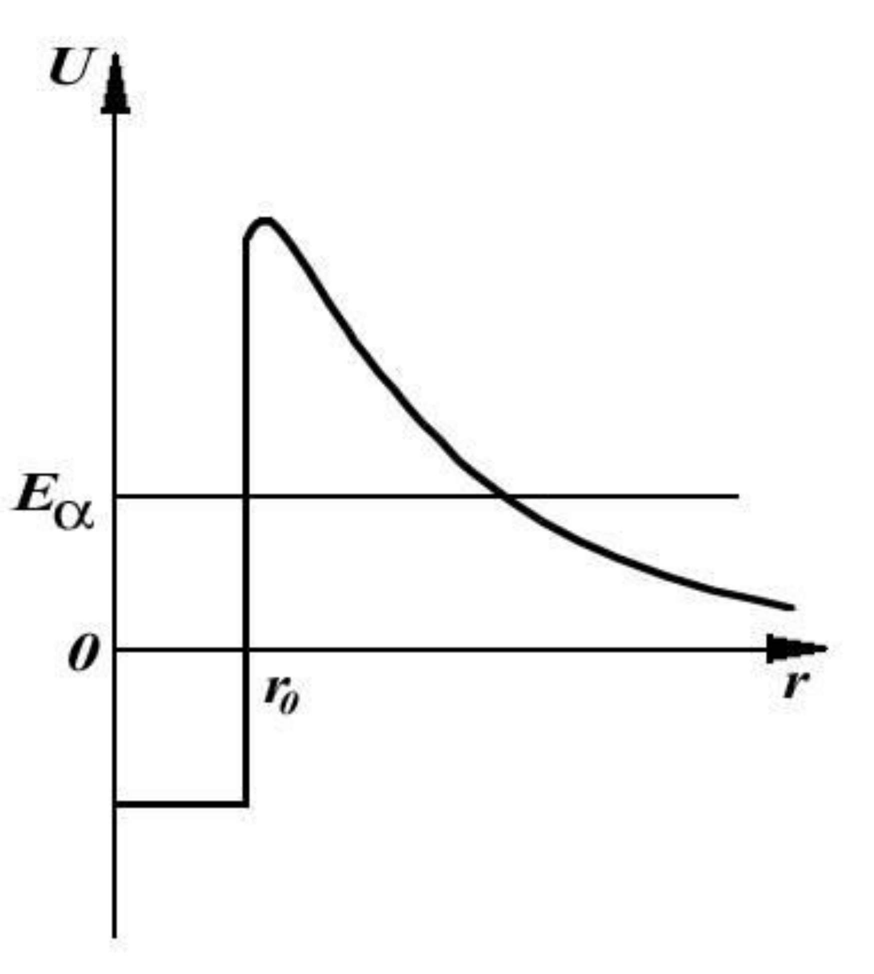
Туннельный эффект широко используется в электронной микроскопии и микроэлектронике.

Радиоактивный альфа-распад – пример туннелирования частиц



α-распад – это самопроизвольное испускание радиоактивным ядром альфа-частицы, т.е. ядра атома гелия, состоящего из двух протонов и двух нейтронов.

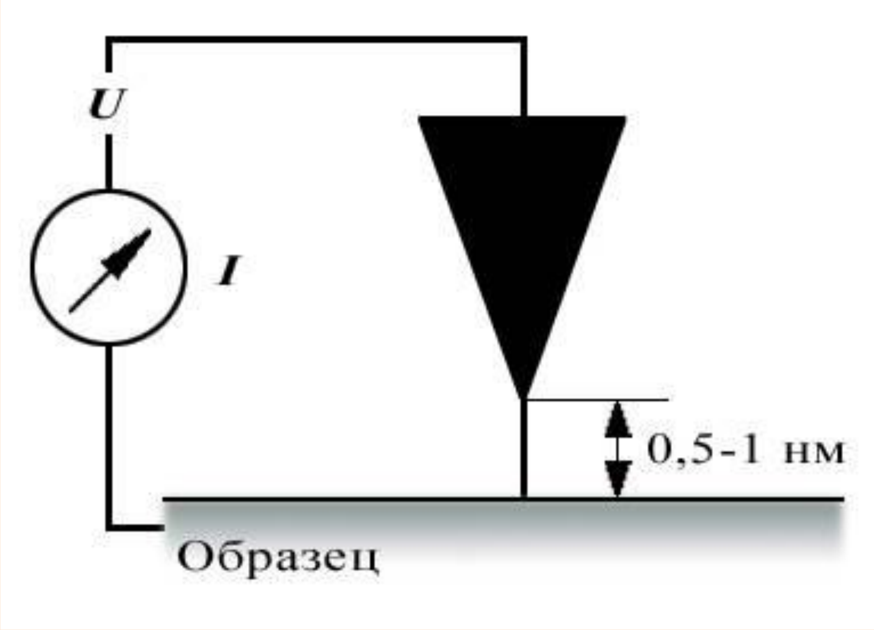
Потенциальная энергия альфа-частицы в поле дочернего ядра



Высота потенциального барьера при альфа-распаде порядка 20-30 МэВ, тогда как энергия испущенных частиц лежит в пределах 5-6 МэВ, т.е. существенно меньше высоты барьера. Это означает, что альфа-частицы могут испускаться ядрами только за счет туннельного эффекта.

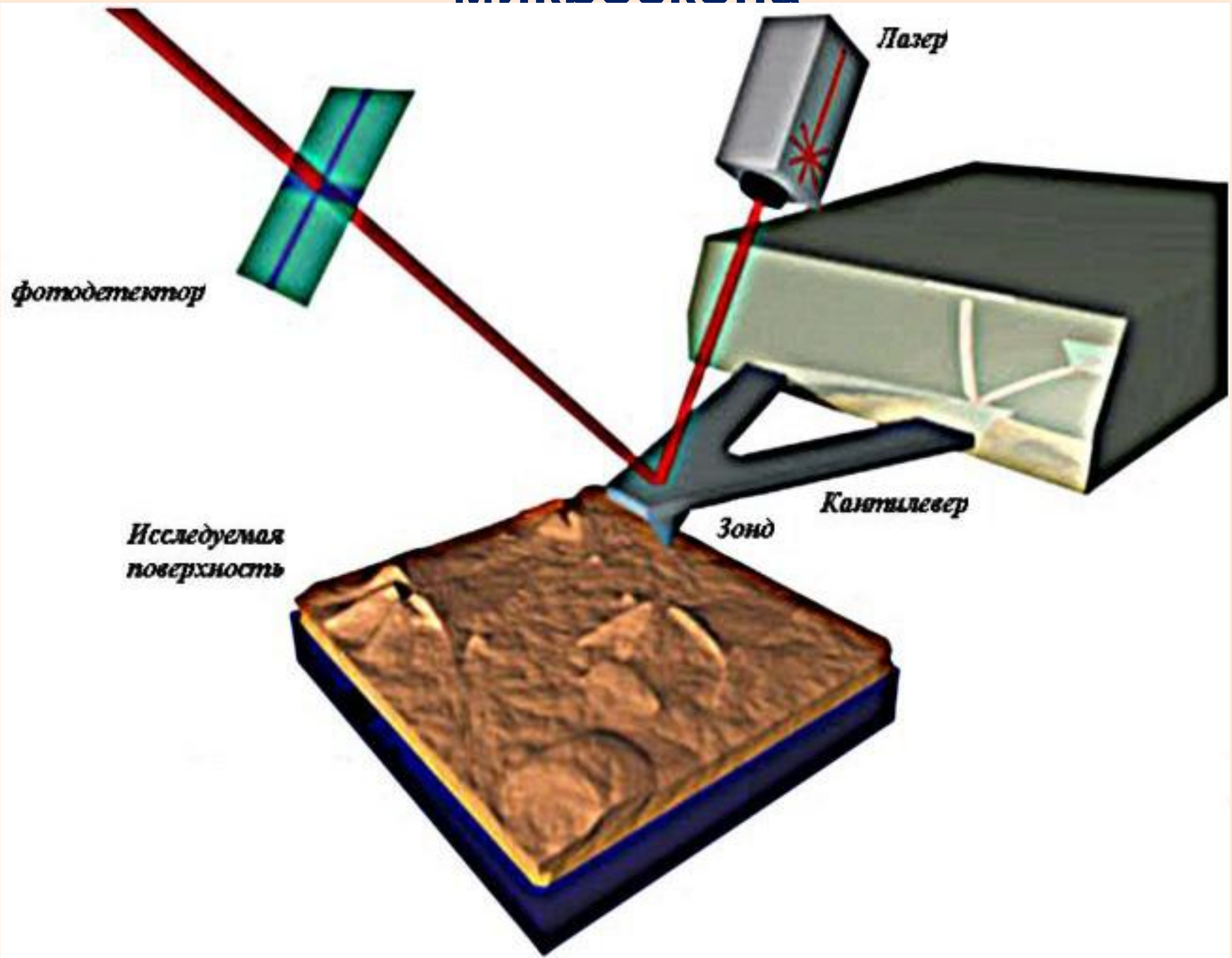
Туннельная микроскопия

Сканирующий туннельный микроскоп (СТМ) был создан в 1982 г сотрудниками исследовательского отдела фирмы IBM *Г. Биннигом* и *Х. Рёрером.*

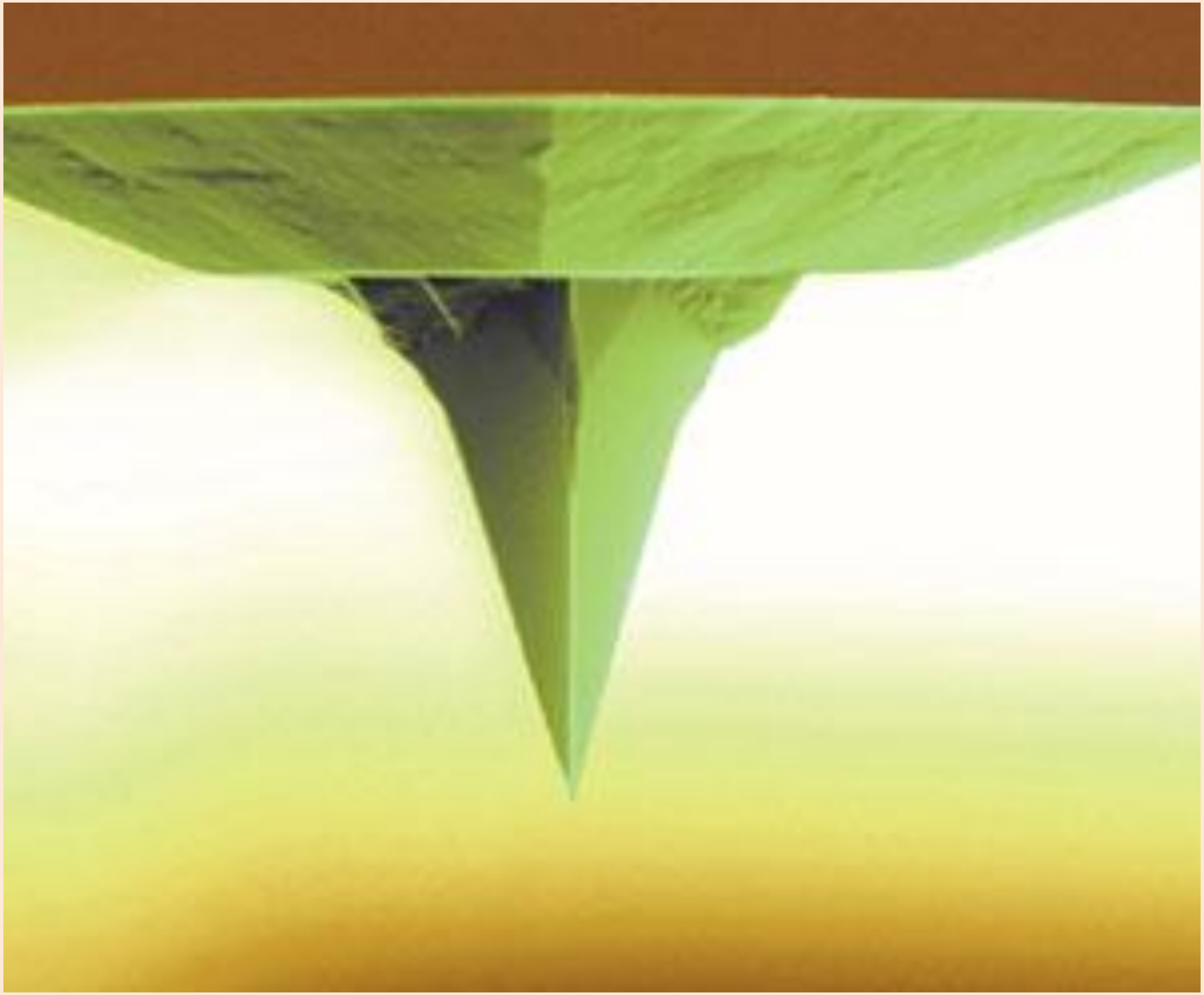


К поверхности проводящего образца на расстояние, составляющее доли нанометра, подводится очень тонкое металлическое острие (игла). При приложении между образцом и иглой разности потенциалов в цепи появляется ток, обусловленный туннелированием электронов через зазор

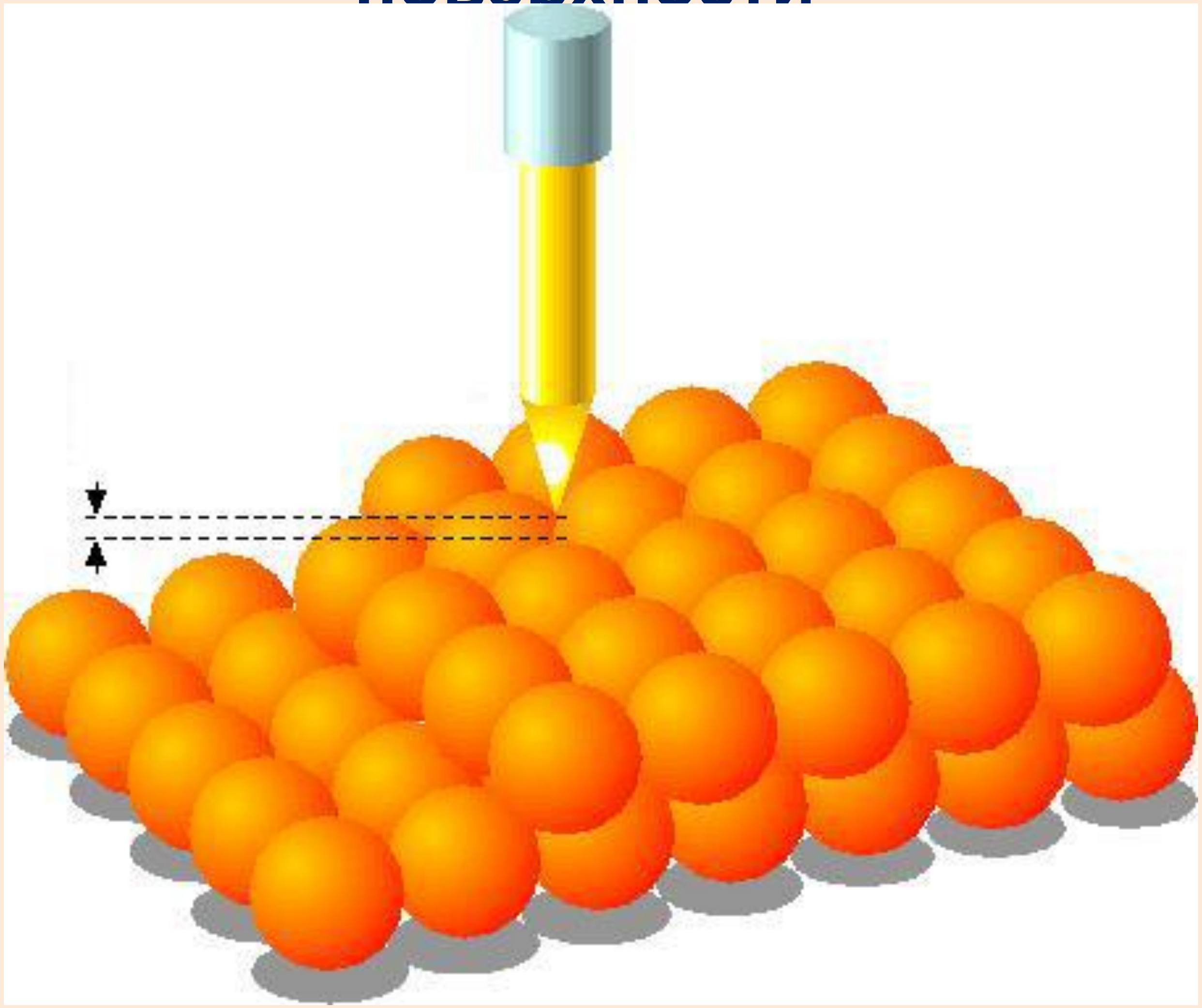
Атомный силовой микроскоп. Принцип работы сканирующего зондового микроскопа

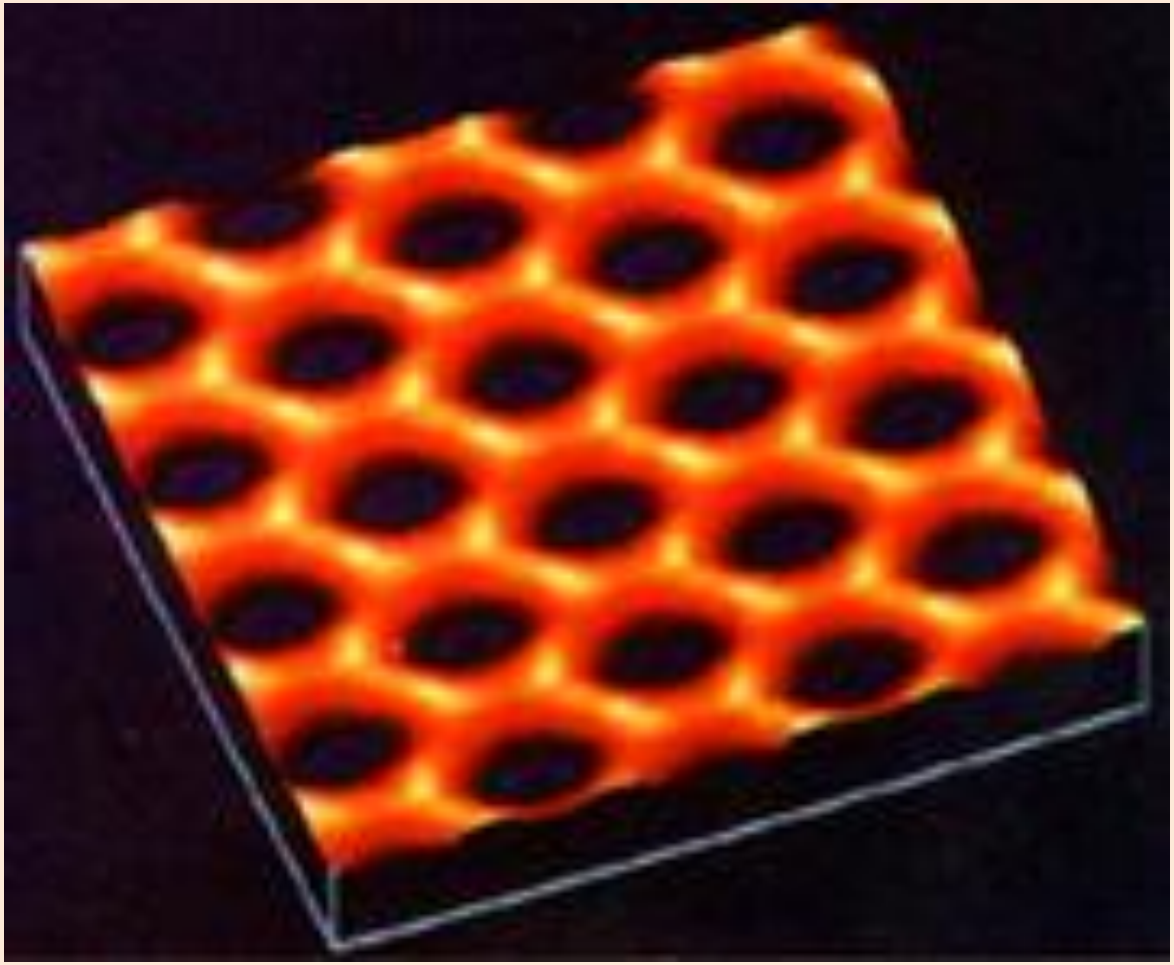


Остриё шипа



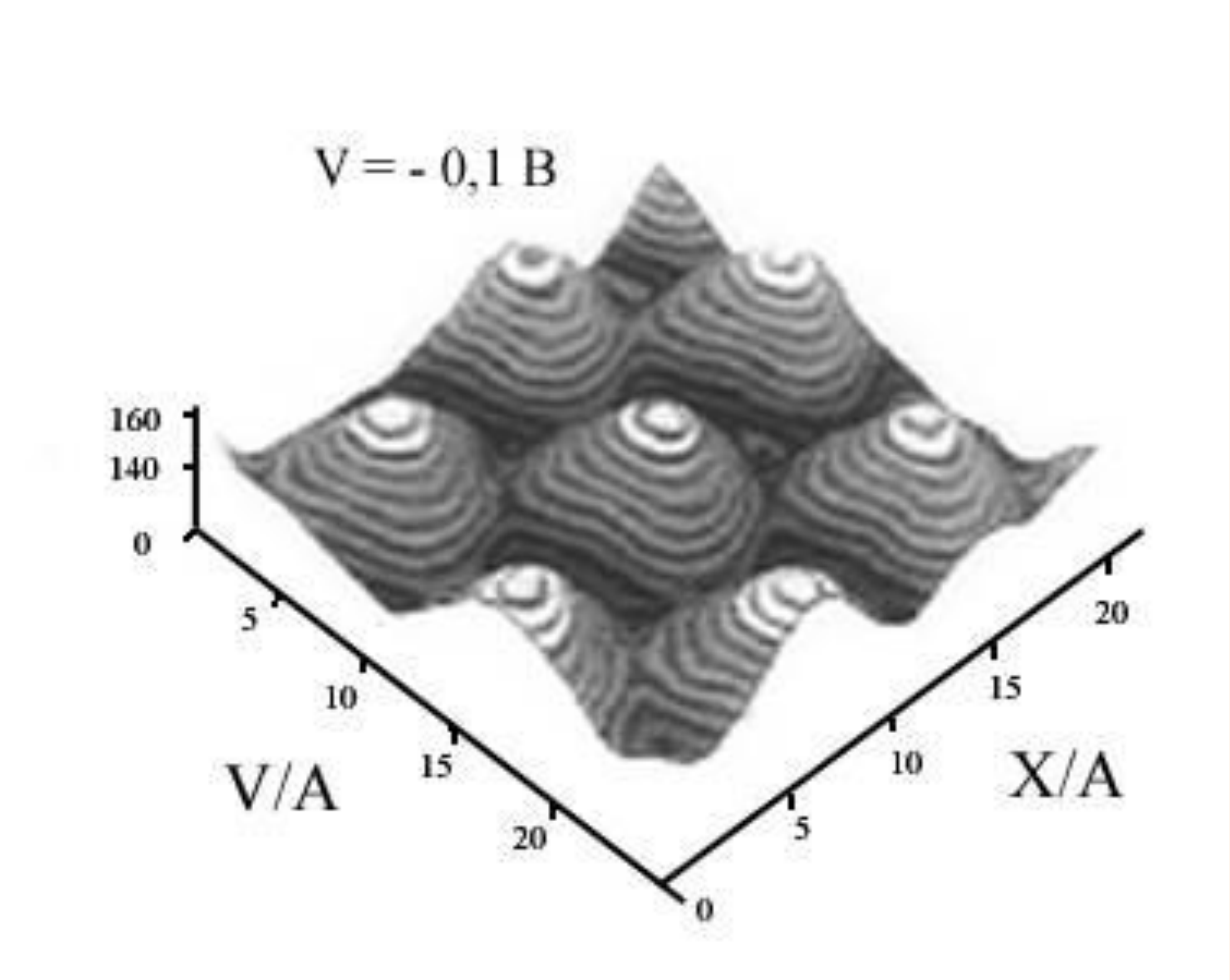
Игла сканирующего туннельного микроскопа, находящаяся на постоянном расстоянии (см. стрелки) над слоями атомов исследуемой поверхности





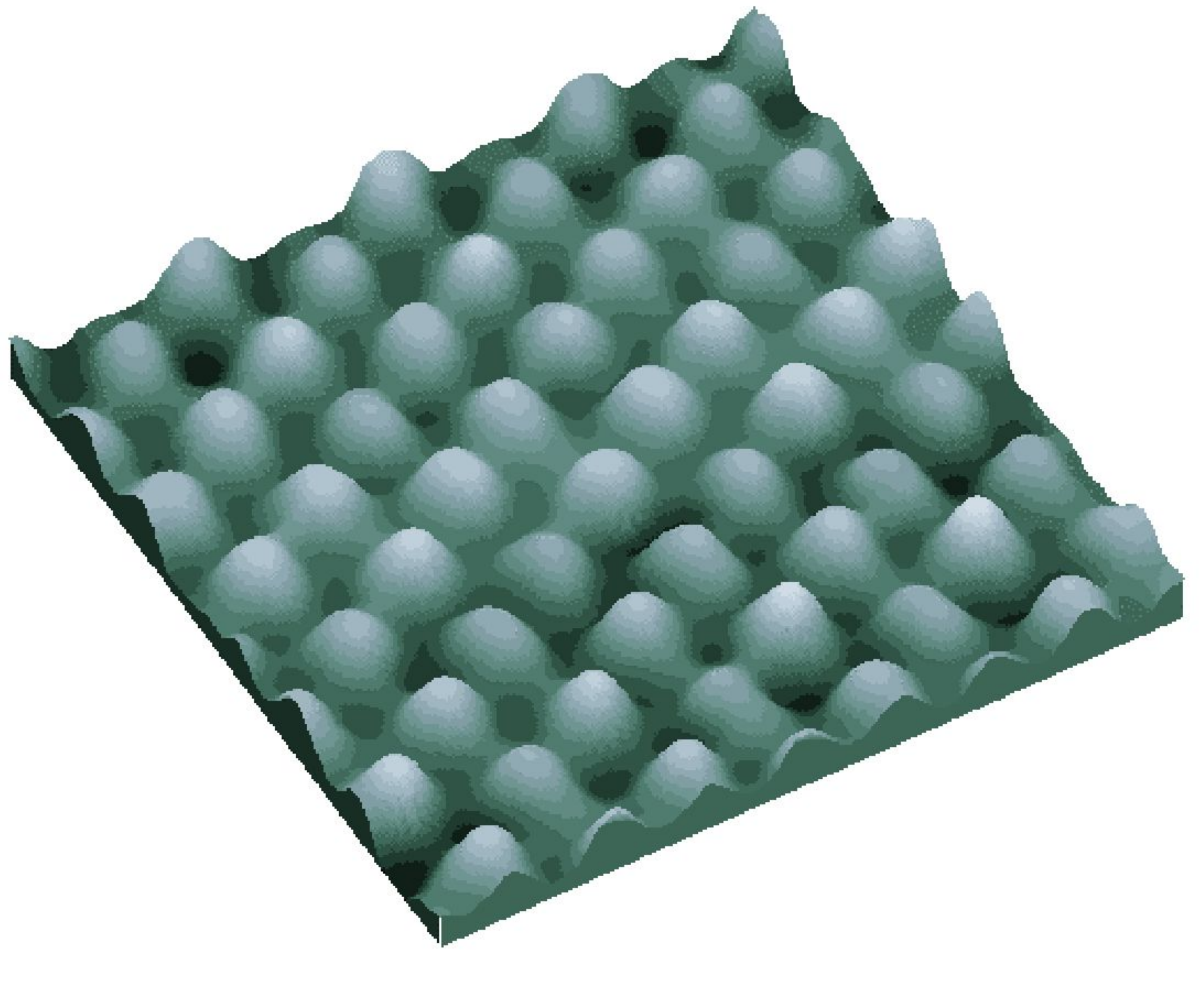
Изображение атомов углерода на поверхности графита, полученное с помощью туннельного микроскопа.
Оранжевые линии - изображение электронных орбит, черные области - положение ядер атомов графита.

Изображение молекул углерода C_{60}, адсорбированных на поверхности кристалла меди.

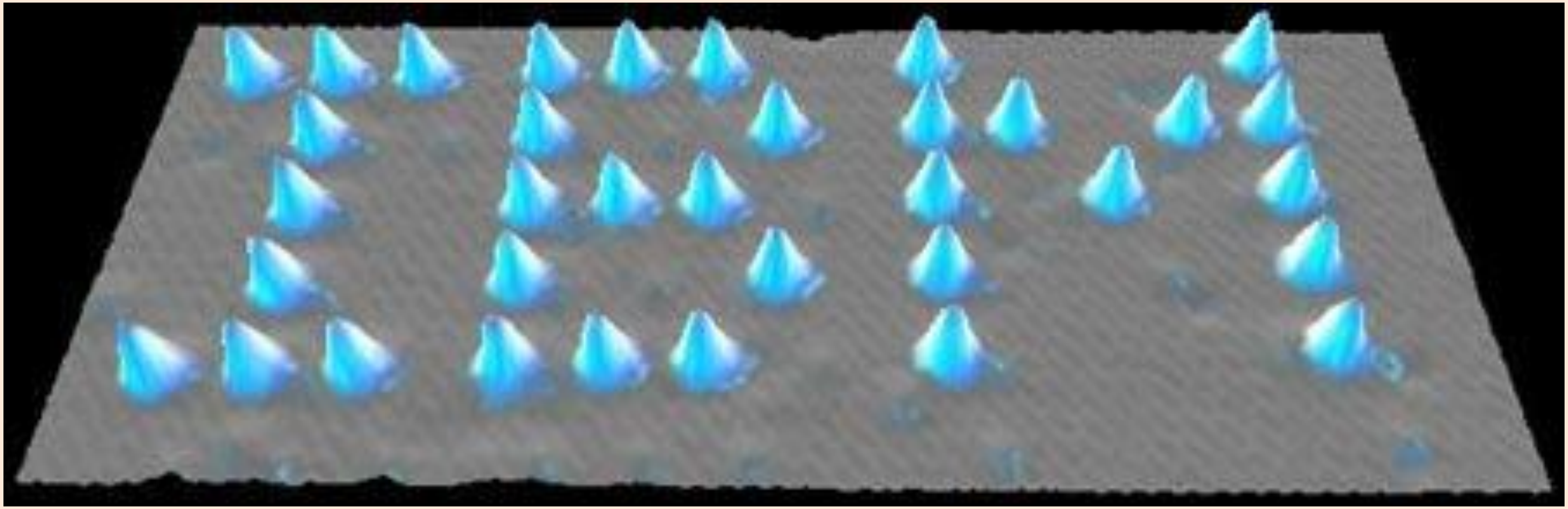


Нанотехнология – это исследование и изготовление приборных структур нанометрового размера.

Атомная структура поверхности высокоориентированного пиролитического графита. Размер изображения 17x17x2 Å



Туннельная микроскопия с низкотемпературным сканированием



- Надпись IBM составлена из атомов ксенона.
- Микроскоп, способен визуализировать отдельные атомы на металлической или полупроводниковой поверхности.

«Квантовый коралл» - 48 атомов железа, расположенных в форме овала.