

Государственный университет «Дубна»
Факультет естественных и инженерных наук
Кафедра Ядерной физики

Специальный семинар по физике ядра и ядерным реакциям

В.В.Самарин

Экспериментальные и теоретические основы квантовой теории.

Вопросы 1, 2, 3.

2017

Вопрос 1

- Экспериментальные факты, лежащие в основе квантовой теории.
- Волновые и корпускулярные свойства материи.
- Основные постулаты квантовой механики.
- Волновая функция и уравнение Шредингера.

Экспериментальные факты, лежащие в основе квантовой теории: кванты

1. Спектральная плотность теплового излучения и формула Планка (Нобелевская премия 1918 г.)

Тепловым (или температурным) излучением называется электромагнитное излучение, причиной которого является возбуждение атомов и молекул вещества вследствие их теплового движения. Мощность электромагнитного излучения, испускаемого единицей поверхности нагретого до температуры T тела в малом интервале длин волн $d\lambda$, представляют в виде

$$dW_{\lambda, \lambda+d\lambda}^{\text{изл}} = dR = r_{\lambda T} d\lambda$$

Макс Планк, в 1900 г. ввел квант действия (постоянную Планка) $E=hf$, основываясь на гипотезе о квантовой природе излучения, получил формулу для функции $f(\lambda, T)$ (функция Планка)

$$f(\lambda, T) = \frac{r_{\lambda, T}}{a_{\lambda, T}} = 2\pi \frac{hc^2}{\lambda^5} \cdot \frac{1}{\exp\left(\frac{hc}{kT\lambda}\right) - 1} = \frac{cc_1}{4\lambda^5} \cdot \frac{1}{\exp\left(\frac{c_2}{T\lambda}\right) - 1}$$

Первая радиационная постоянная (или первая константа излучения)

$$c_1 = 8\pi hc = 4,99 \cdot 10^{-22} \text{ Дж} \cdot \text{м}$$

Вторая радиационная постоянная (или вторая константа излучения)

$$c_2 = \frac{hc}{k} = 0,01438 \text{ м} \cdot \text{К}$$

Пример расчета в MathCAD

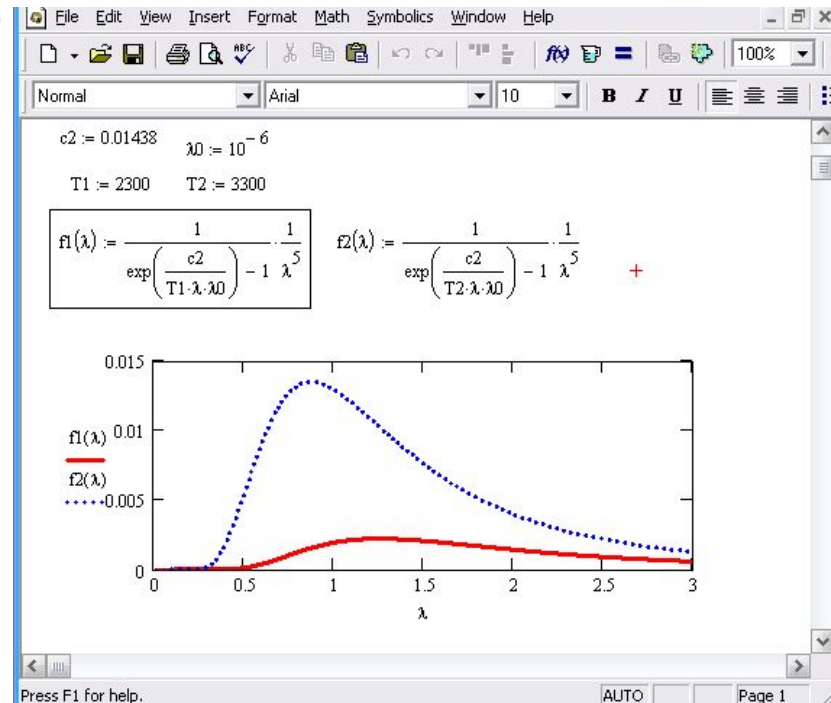
Поглощательная способность тела равна доле падающей на единицу площади мощности излучения, которая телом поглощается

$$a_{\lambda T} = \frac{dW_{\lambda, \lambda+d\lambda}^{\text{полгл}}}{dW_{\lambda, \lambda+d\lambda}^{\text{пад}}}$$

Согласно закону Кирхгофа отношение

$$\frac{r_{\lambda T}}{a_{\lambda T}} = f(\lambda, T)$$

является универсальной функцией, не зависящей от природы тела



Экспериментальные факты, лежащие в основе квантовой теории: **фотоны**

2. Внешний фотоэффект - излучение поглощается квантами $E=h\nu$

Фотоэффектом называется испускание электронов веществом при поглощении им квантов электромагнитного излучения (фотонов). Фотоэффект был открыт в 1887 г. Г.Герцем, который обнаружил, что искровой разряд между двумя электродами происходит при меньшем напряжении, если искровой промежуток освещается светом с большой долей ультрафиолетового излучения. Первые исследования фотоэффекта выполнены А.Г.Столетовым (1888 г.), Ф.Ленардом и Дж. Дж. Томсоном (1889 г.). Основные закономерности фотоэффекта были объяснены в 1905 г. А.Эйнштейном на основе представлений о поглощении энергии электромагнитного поля квантами.

Нобелевская премия по физике (1921 г.).

$$h\nu = A_{\text{вых}} + \frac{mv_{\text{max}}^2}{2}$$

3. Эффект **Комптона** - фотоны имеют энергию и импульс

Нобелевская премия 1925

$$\Delta\lambda = \lambda - \lambda_0 = \frac{h}{mc}(1 - \cos\theta) = 2\frac{h}{mc}\sin^2\frac{\theta}{2}$$

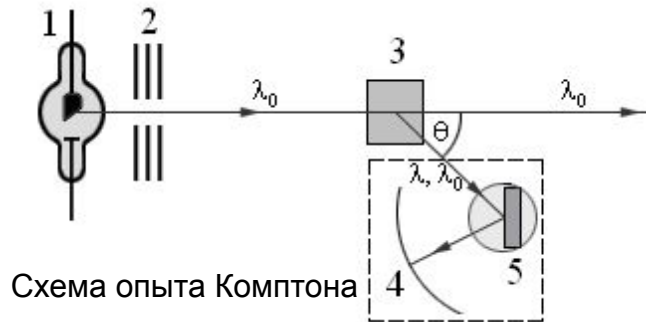
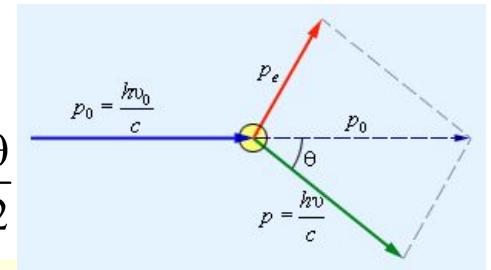
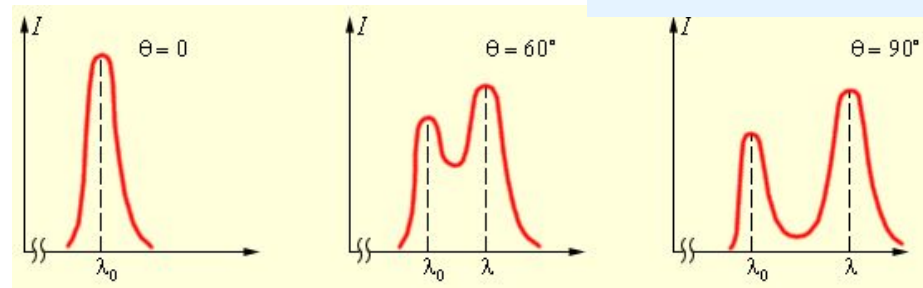


Схема опыта Комптона

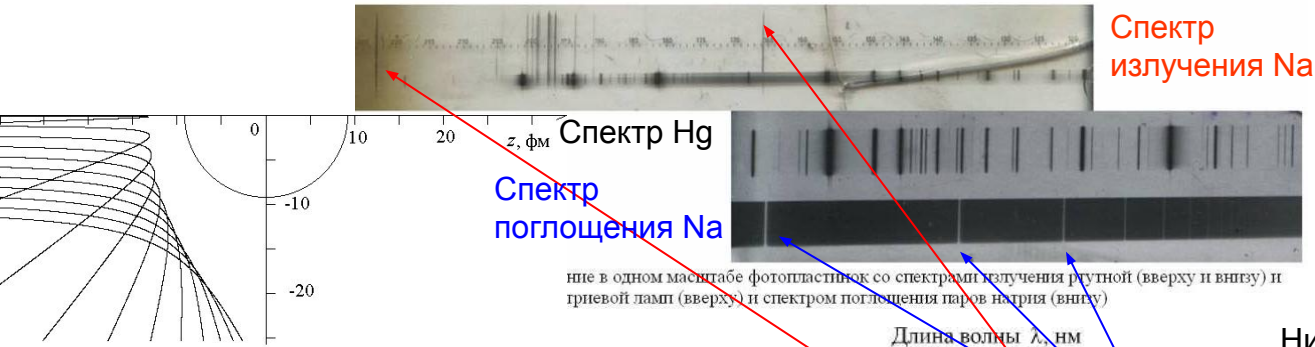


Спектры рассеянного рентгеновского излучения

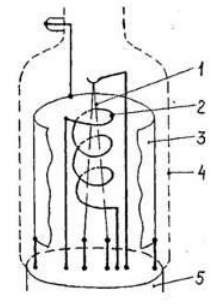
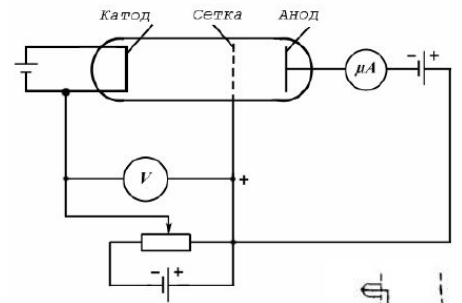
Исходящее из рентгеновской трубки 1 монохроматическое (называемое характеристическим) рентгеновское излучение с длиной волны λ_0 , проходит через свинцовые диафрагмы 2 и в виде узкого пучка направляется на рассеивающее вещество – мишень 3. Излучение, рассеянное под некоторым углом θ , анализируется с помощью спектрографа рентгеновских лучей 4, в котором роль дифракционной решетки играет кристалл 5, закрепленный на поворотном столике.

Экспериментальные факты, лежащие в основе квантовой теории: атомы

1. Опыт Резерфорда 2. Линейчатые атомные спектры



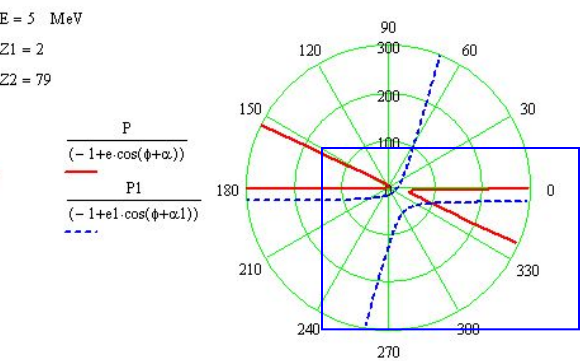
3. Опыт Франка-Герца
Нобелевская премия 1925



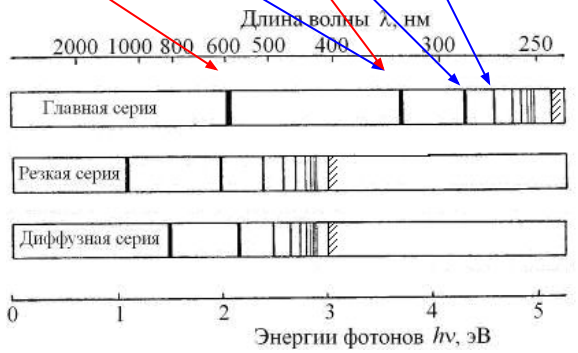
Нить накала 1
одновременно является катодом лампы, сетка 2 выполнена в виде спирали, навитой вокруг нити накала, вокруг сетки расположен цилиндрический катод 3

Классическая картина столкновения ядер $^{16}\text{O} + ^{208}\text{Pb}$ для энергии $E_{\text{ц.м.}} = 70$ МэВ, упругое рассеяние, Окружность – точки соприкосновения ядер.

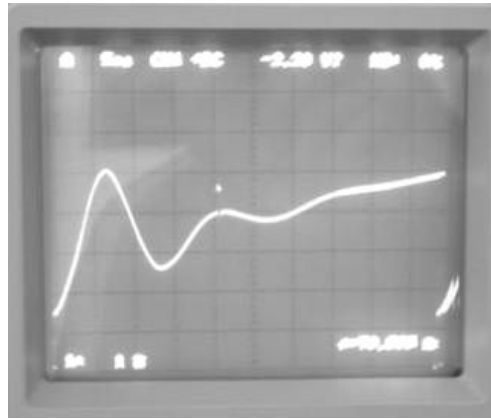
Пример расчетов в MathCAD:



Классическая картина столкновения ядер $^4\text{He} + ^{197}\text{Au}$ для энергии $E_{\text{ц.м.}} = 5$ МэВ,



а) Спектральные серии атома натрия, границы серий показаны штриховкой; б) схема уровней атома натрия переходы между ними, приводящие к образованию серий; рядом с переходами указаны длины волн излучения в нм



5
Пример вольтамперной характеристики

Экспериментальные факты, лежащие в основе квантовой теории: волновые свойства частиц

1. Дифракция электронов:

- а) при отражении от поверхности монокристаллов (К. Девиссон)
 - б) при прохождении через фольгу (Дж. П. Томсон)
- Нобелевская премия 1937.

2. Длина волны де Бройля
Нобелевская премия 1929.

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

3. Эффект Рамзауэра

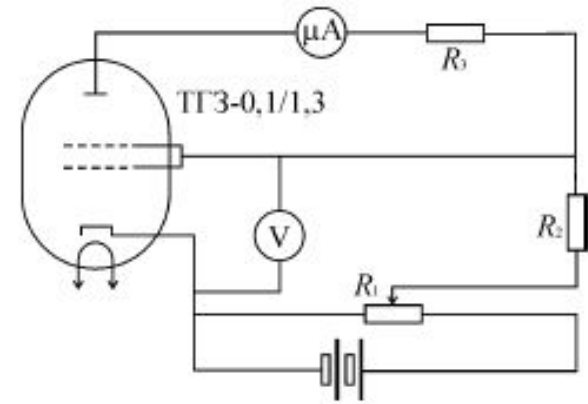


Рис. 7. Блок-схема опыта по изучению эффекта Рамзауэра.

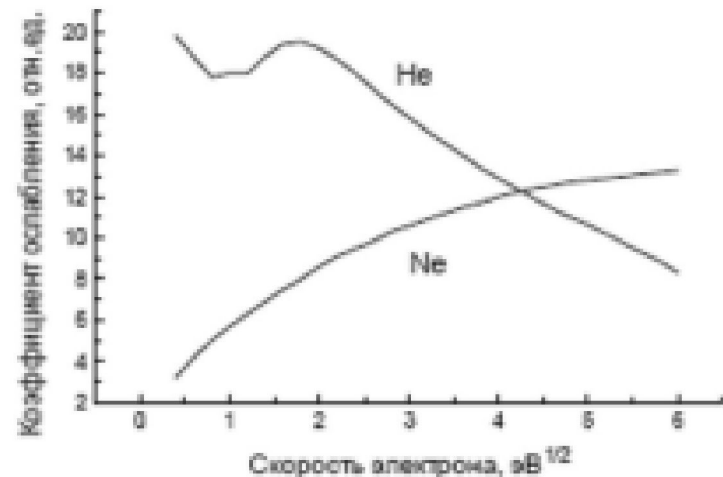
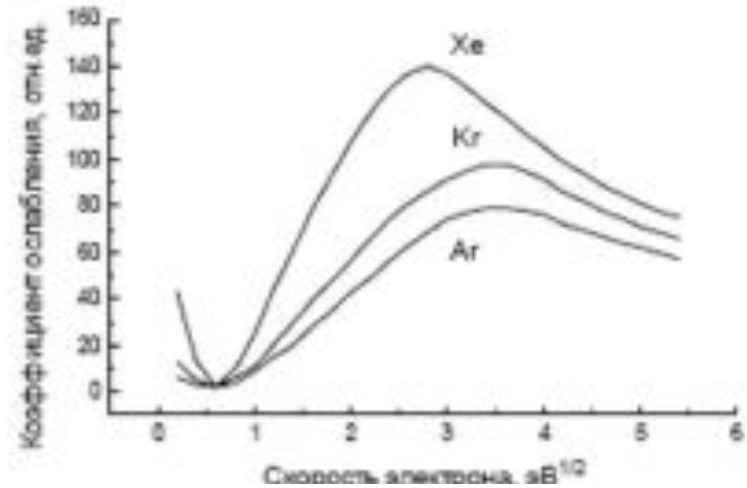


Рис. 1. Наблюдаемые зависимости эффективных сечений рассеяния от скорости электрона

Основные постулаты квантовой механики.

1. Физическим величинам сопоставляются операторы. Энергии сопоставлен оператор Гамильтона (гамильтониан) \hat{H} .

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p} = -i\hbar \nabla, \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(r), \quad \hat{f} = f(r, p)$$

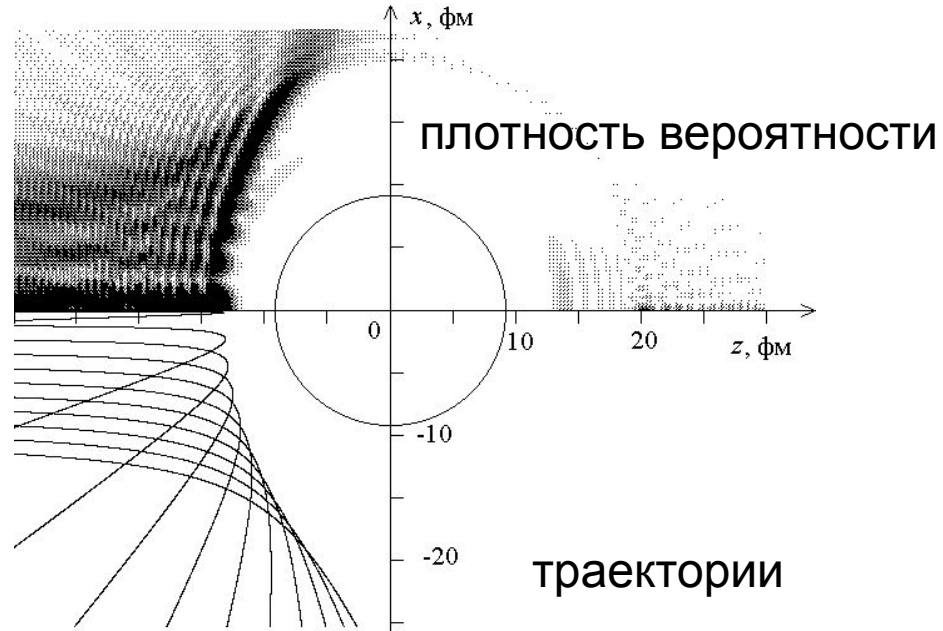
2. Средние значения физической величины f при измерении для некоторого состояния системы равно интегралу

$$\bar{f} = \int \psi^* \hat{f} \psi dq$$

где ψ – волновая функция системы. В стационарном состоянии с ψ_n – собственной функцией оператора при измерении f получится собственное значение оператора f_n . Стационарное уравнение Шредингера $\hat{H}\psi = E\psi$.
Плотность вероятности

3. Матрицы операторов

4. В квазиклассическом пределе $\hbar \rightarrow 0$ $\psi \rightarrow a \exp(iS/\hbar)$, $f_{nm} = \int \psi_n^* \hat{f} \psi_m dq$
 S – действие.
В пределе малых длин волн де Бройля плотность вероятности соответствует классическим траекториям частицы.



Квантовая (верхняя половина) и классическая (нижняя половина) картины столкновения ядер $^{16}\text{O} + ^{208}\text{Pb}$: для энергии $E=70$ МэВ, упругое рассеяние. Окружность - точки соприкосновения ядер. Степень почернения пропорциональна плотности вероятности

Соотношение неопределенности Гейзенберга

$$\hat{p}_x x - x \hat{p}_x = -i\hbar \quad \longrightarrow \quad \Delta p_x \Delta x \geq \hbar$$

Волновая функция и уравнение Шредингера

Стационарное уравнение Шредингера

$$\hat{H}\psi = E\psi, \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + U(\mathbf{r})\psi = E\psi, \quad \Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U(\mathbf{r}))\psi = 0$$

Нестационарное уравнение Шредингера

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi, \quad i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + U(\mathbf{r}, t)\Psi,$$

Изменение со временем средних значений физических величин

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\bar{f} &= \frac{d}{dt}\int\Psi^*\hat{f}\Psi dq = \int\Psi^*\left(\frac{\partial}{\partial t}\hat{f}\right)\Psi dq + \int\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\hat{f}\Psi dq + \int\Psi^*\hat{f}\frac{\partial\Psi}{\partial t}dq = \\ &= \int\Psi^*\left(\frac{\partial}{\partial t}\hat{f}\right)\Psi dq + \frac{1}{i\hbar}\left(\int\Psi^*\hat{f}\hat{H}\Psi dq - \int\Psi^*\hat{H}\hat{f}\Psi dq\right) = \int\Psi^*\dot{\hat{f}}\Psi dq \end{aligned}$$

Дифференцирование операторов по времени $\dot{\hat{f}} = \frac{\partial\hat{f}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}(\hat{H}\hat{f} - \hat{f}\hat{H})$

Пример: оператор производной скорости по времени – оператор ускорения

$$m\dot{\hat{v}} = m\frac{i}{\hbar}(\hat{H}\hat{v} - \hat{v}\hat{H}) = -\nabla U$$

Вопрос 2

- Описание эволюции квантово-механических систем. Уравнения Гейзенберга и Шредингера.
- Стационарные состояния.
- Линейный квантовый гармонический осциллятор.

Описание эволюции квантово-механических систем. Уравнения Гейзенберга и Шредингера.

Изменение со временем волновой функции в представлении Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi, \quad \Psi(t) = \left(1 - \frac{i}{\hbar} \hat{H}t - \frac{1}{\hbar^2} \hat{H}\hat{H}t^2 + \dots \right) \Psi(0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t\right) \Psi(t=0).$$

Изменение со временем плотности вероятности в представлении Шредингера

$$\frac{\partial}{\partial t}(\Psi^* \Psi) = \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = \Psi^* \frac{1}{i\hbar} \hat{H}\Psi - \frac{1}{i\hbar} \Psi \hat{H}\Psi^*,$$

Волновая функция в представлении Гейзенберга (H) не зависит от времени $\Psi_H = \Psi(0) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \hat{H}t\right) \Psi(t)$

Операторы в представлении Гейзенберга зависят от времени t : $\hat{f}_H = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \hat{H}t\right) \hat{f} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t\right)$, $\hat{H}_H \equiv \hat{H}$

Средние значения физических величин в представлениях Шредингера и Гейзенберга (H) $\bar{f} = \int \Psi^*(t) \hat{f} \Psi(t) dq$

$$\bar{f} = \int \left[\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t\right) \Psi(0) \right]^* \hat{f} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t\right) \Psi(0) dq = \int \Psi_H^* \exp\left(\frac{i}{\hbar} \hat{H}t\right) \hat{f} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t\right) \Psi_H dq = \int \Psi_H^* \hat{f}_H \Psi_H dq$$

Изменение со временем средних значений физических величин в представлениях Шредингера и Гейзенберга (H)

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{f} = \frac{\partial}{\partial t} \int \Psi^*(t) \hat{f} \Psi(t) dq = \frac{\partial}{\partial t} \int \Psi_H^* \hat{f}_H \Psi_H dq = \int \Psi_H^* \frac{d}{dt} \hat{f}_H \Psi_H dq = \int \Psi_H^* \left(\frac{\partial \hat{f}_H}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} (\hat{H}\hat{f}_H - \hat{f}_H\hat{H}) \right) \Psi_H dq$$

Уравнения для операторов в представлении Гейзенберга

$$\frac{d}{dt} \hat{f}_H = \frac{\partial \hat{f}_H}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} (\hat{H}\hat{f}_H - \hat{f}_H\hat{H})$$

Изменение со временем плотности вероятности: свободное движение волнового пакета

Для одномерного нестационарного уравнения Шредингера

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

Начальное условие для $U(x) = 0$

$$\Psi(x, 0) = A \exp \left[-\frac{x^2}{2a^2} + ik_0 x \right]$$

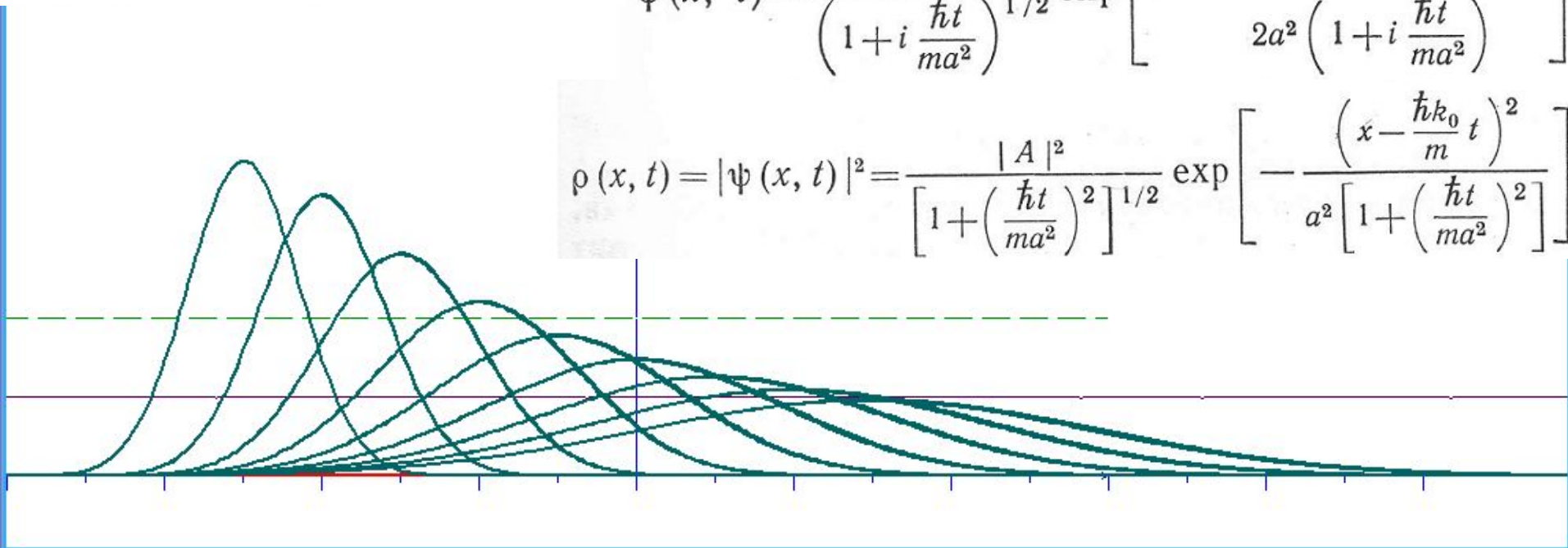
ставится задача Коши с начальным условием

$$\Psi(x, t_0) = \Psi_0(x).$$

Точное решение

$$\Psi(x, t) = \frac{A}{\left(1 + i \frac{\hbar t}{ma^2}\right)^{1/2}} \exp \left[-\frac{x^2 - 2ia^2 k_0 x + i \frac{\hbar t}{2m} k_0^2 a^2}{2a^2 \left(1 + i \frac{\hbar t}{ma^2}\right)} \right]$$

$$\rho(x, t) = |\Psi(x, t)|^2 = \frac{|A|^2}{\left[1 + \left(\frac{\hbar t}{ma^2}\right)^2\right]^{1/2}} \exp \left[-\frac{\left(x - \frac{\hbar k_0}{m} t\right)^2}{a^2 \left[1 + \left(\frac{\hbar t}{ma^2}\right)^2\right]} \right]$$



Изменение со временем плотности вероятности: столкновение волнового пакета с барьером

В компьютерной модели численное решение $\Psi_j^v = \Psi(x_j, t_v)$ находится в узлах двумерной сетки с шагами h, τ

$$x_j = x_a + (j-1)h, \quad j=1, \dots, n; \quad x_n = x_b, \quad h = (x_b - x_a)/(n-1) \quad (4)$$

$$t_v = v\tau, \quad v = 0, \dots, M \quad (5)$$

Рассмотрим схему численного решения в системе единиц, где $\hbar = 1, m = 1$

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + u(x, t) \Psi \quad (6)$$

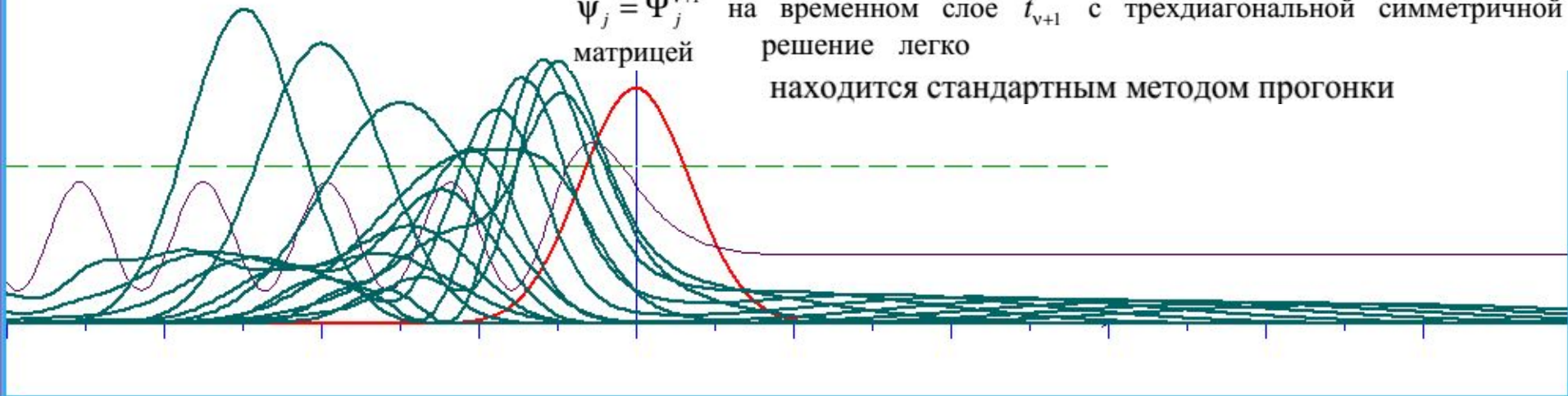
Разностная аппроксимация уравнения (6) записывается с коэффициентами $\sigma \leq 1, \sigma_1 = 1 - \sigma$

$$i \frac{\Psi_j^{v+1} - \Psi_j^v}{\tau} = -\sigma \frac{1}{2} \frac{\Psi_{j-1}^{v+1} - 2\Psi_j^{v+1} + \Psi_{j+1}^{v+1}}{h^2} - \sigma_1 \frac{1}{2} \frac{\Psi_{j-1}^v - 2\Psi_j^v + \Psi_{j+1}^v}{h^2} + \sigma u(x_j, t_{v+1}) \Psi_j^{v+1} + \sigma_1 u(x_j, t_v) \Psi_j^v \quad (6)$$

Граничные условия $\Psi_1^v = 0, \Psi_n^v = 0$ и схема (8) приводят к системе линейных уравнений для неизвестных $\Psi_j = \Psi_j^{v+1}$ на временном слое t_{v+1} с трехдиагональной симметричной матрицей решение легко

находится стандартным методом прогонки

Туннельный эффект для волнового пакета



**Пример изменения со временем плотности вероятности:
одномерная модель реакции передачи нейтрона при
столкновении атомных ядер**

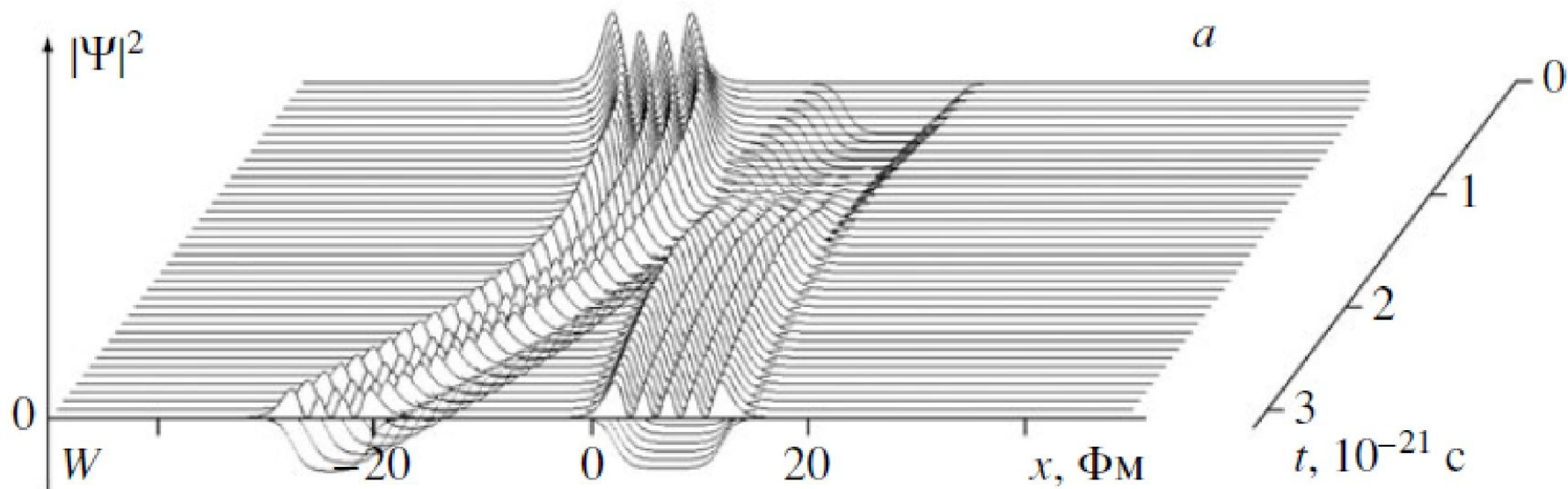


Рис. 3. Зависящая от времени потенциальная энергия нейтрона $W(x, t)$ и эволюция плотности вероятности в одномерной полуклассической модели столкновения $^{18}\text{O} + ^{58}\text{Ni}$ для энергии в с.ц.м. $E_{\text{с.ц.м.}} = 30 \text{ МэВ}$ (а),

Линейный квантовый гармонический осциллятор (с помощью полиномов Эрмита $H_n(x)$)

$$\hat{H}\psi = E\psi, \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + \frac{m\omega^2 x^2}{2}\psi = E\psi,$$

$$\psi'' + \left(\frac{2m}{\hbar^2} E - m^2 \omega^2 x^2 \right) \psi = 0, \quad E = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

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

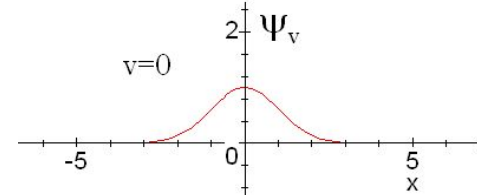
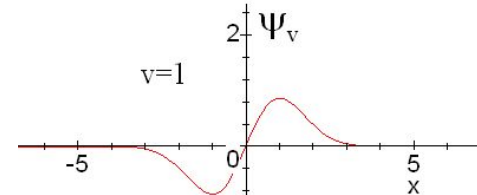
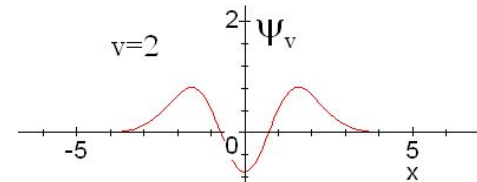
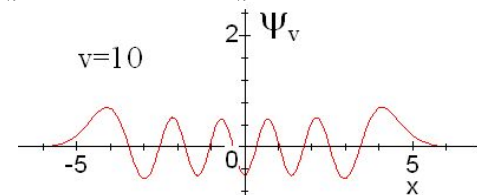
$$H_0(x) = 1, H_1(x) = 2x, H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_k(x)H_n(x)\exp(-x^2)dx = 2^n n! \sqrt{\pi} = \|H_n\|^2$$

$$H_n''(x) - 2xH_n'(x) + 2nH_n(x) = 0$$

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\|H_n\|} H_n(x) \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right)$$

$$\psi_n''(x) + (\lambda - x^2)\psi_n(x) = 0, \quad \lambda = 2n + 1$$



Maple V Release 4 - [Osc1.mws]

```
File Edit View Insert Format Options Window Help
C 2D Output Times New Roman 12
> with(orthopoly);
[G, H, L, P, T, U]
> n:=10; H(n, x); f:=n!;
n:=10
1024 x^10 - 23040 x^8 + 161280 x^6 - 403200 x^4 + 302400 x^2 - 30240
f:=3628800
> plot(H(n, x)*exp(-x*x/2)/sqrt(2^n*n!*sqrt(Pi)), x=-10..10);
```

Пример расчета
в Maple

Time: 0.0s Bytes: OK Free: 2097151K

Линейный квантовый гармонический осциллятор

(с помощью полиномов Эрмита $H_n(x)$)

$$\hat{H}\psi = E\psi, \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + \frac{m\omega^2 x^2}{2}\psi = E\psi,$$

$$\psi'' + \left(\frac{2m}{\hbar^2} E - m^2 \omega^2 x^2 \right) \psi = 0,$$

$$E = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), n = 0, 1, 2, \dots$$

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

$$H_0(x) = 1, H_1(x) = 2x, H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x)$$

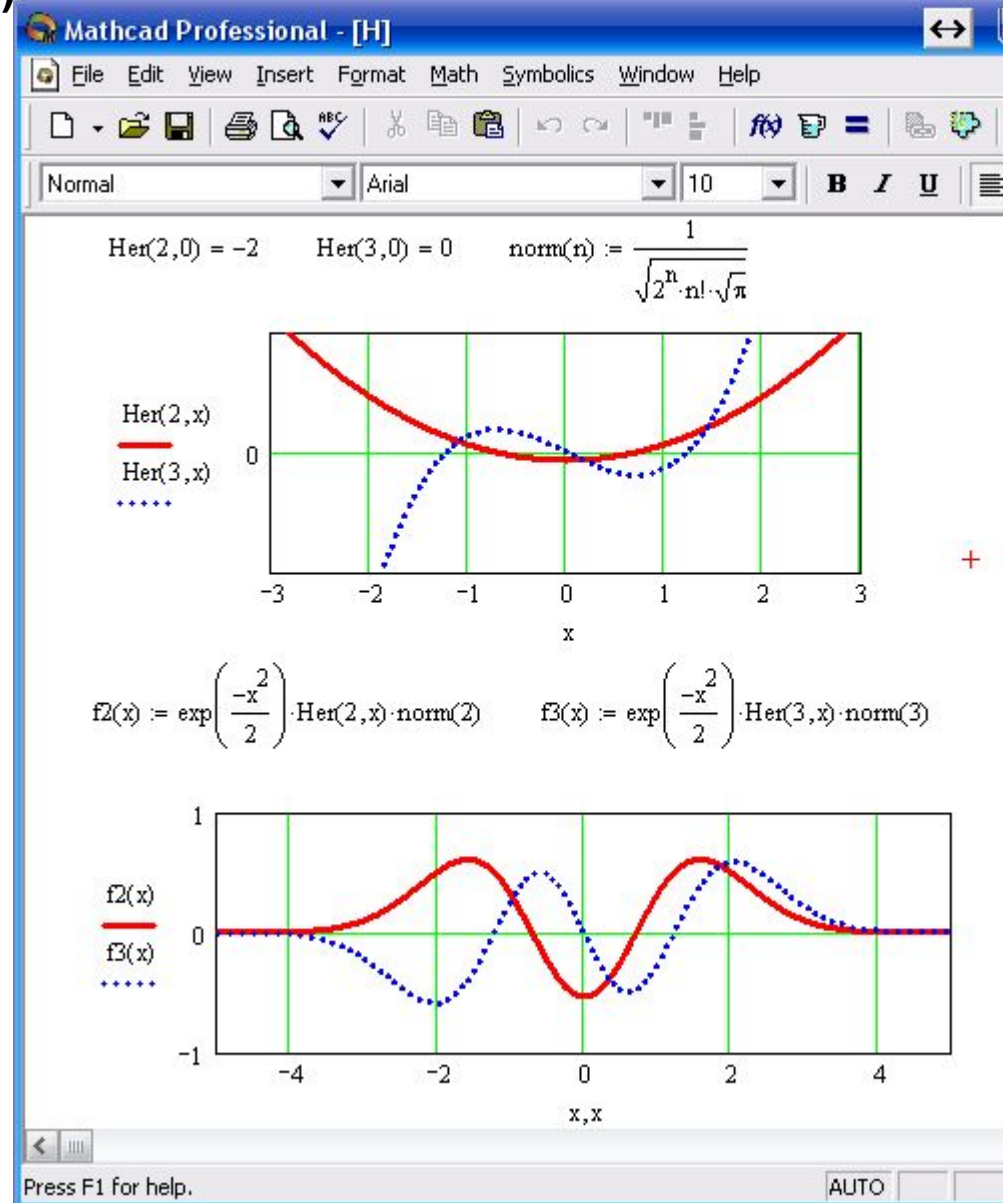
$$\int_{-\infty}^{\infty} H_k(x)H_n(x)\exp(-x^2)dx = 2^n n! \sqrt{\pi} = \|H_n\|^2$$

$$H_n''(x) - 2xH_n'(x) + 2nH_n(x) = 0$$

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\|H_n\|} H_n(x) \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right)$$

$$\psi_n''(x) + (\lambda - x^2)\psi_n(x) = 0, \lambda = 2n + 1$$

Пример расчета в MathCAD



Линейный квантовый гармонический осциллятор (матричный метод)

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}. \quad (25,1)$$

Поскольку потенциальная энергия обращается в бесконечность при $x \rightarrow \pm\infty$, то частица может совершать лишь финитное движение. В соответствии с этим весь спектр собственных значений энергии будет дискретным.

Определим уровни энергии осциллятора матричным методом¹⁾. Будем исходить из «уравнений движения» в форме (21,2); в данном случае они дают

$$\hat{v} = \frac{i}{m\hbar} (\hat{H}\hat{v} - \hat{v}\hat{H}) = -\frac{1}{m} \nabla U \hat{x} + \omega^2 x = 0. \quad (25,2)$$

В матричном виде это уравнение гласит

$$(\ddot{x})_{mn} + \omega^2 x_{mn} = 0.$$

Для матричных элементов ускорения имеем, согласно (11,8),

$$(\dot{x})_{mn} = i\omega_{mn} (x)_{mn} = -\omega_{mn}^2 x_{mn}. \text{ Поэтому получаем}$$

$$(\omega_{mn}^2 - \omega^2) x_{mn} = 0.$$

Отсюда видно, что равны нулю все матричные элементы x_{mn} , за исключением тех, для которых $\omega_{mn} = \pm\omega$. Пронумеруем все стационарные состояния таким образом, чтобы частоты $\pm\omega$ соответствовали переходам $n \rightarrow n \mp 1$, т. е. $\omega_{n, n \mp 1} = \pm\omega$. Тогда отличными от нуля матричными элементами будут лишь $x_{n, n \pm 1}$.

Будем предполагать, что волновые функции ψ_n выбраны вещественными. Поскольку x есть величина вещественная, то такими же будут и все матричные элементы x_{mn} . Условие эрмитовости (11,10) приводит теперь к равенству $x_{mn} = x_{nm}$, т. е. матрица x_{mn} симметрична.

Для вычисления отличных от нуля матричных элементов координаты воспользуемся правилом коммутации

$$\hat{x} \hat{x} - \hat{x} \hat{x} = -i \frac{\hbar}{m},$$

написав его в матричном виде:

$$(\dot{x}\dot{x})_{mn} - (x\dot{x})_{mn} = -\frac{i\hbar}{m} \delta_{mn}.$$

С помощью правила умножения матриц (11,12) имеем отсюда для $m=n$

$$i \sum_l (\omega_{nl} x_{nl} x_{ln} - x_{nl} \omega_{ln} x_{ln}) = 2i \sum_l \omega_{nl} x_{nl}^2 = -i \frac{\hbar}{m}.$$

В этой сумме отличны от нуля только члены с $l=n \pm 1$, так что получаем

$$(x_{n+1, n})^2 - (x_{n, n-1})^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}. \quad (25,3)$$

Из этого равенства заключаем, что величины $(x_{n+1, n})^2$ образуют арифметическую прогрессию, не ограниченную сверху, но непременно ограниченную снизу, так как в ней могут содержаться только положительные члены. Поскольку мы пока установили только относительное расположение номеров состояний n , но не их абсолютные значения, то мы можем произвольно выбрать значение n , соответствующее первому — нормальному — состоянию осциллятора. Положим его равным нулю. Соответственно этому $x_{0, -1}$ надо считать тождественно равным нулю, и последовательное применение уравнений (25,3) с $n=0, 1, 2, \dots$ приводит к результату

$$(x_{n, n-1})^2 = \frac{n\hbar}{2m\omega}.$$

Таким образом, окончательно получаем следующее выражение для отличных от нуля матричных элементов координаты:

$$x_{n, n-1} = x_{n-1, n} = \sqrt{\frac{n\hbar}{2m\omega}}. \quad (25,4)$$

Матрица оператора \hat{H} диагональна и матричные элементы H_{nn} представляют собой искомые собственные значения

энергии E_n осциллятора. Для их вычисления пишем

$$\begin{aligned} H_{nn} = E_n &= \frac{m}{2} [(\dot{x})_{nn}^2 + \omega^2 (x)_{nn}^2] = \frac{m}{2} \left[\sum_l i\omega_{nl} x_{nl} i\omega_{ln} x_{ln} + \omega^2 \sum_l x_{nl} x_{ln} \right] = \\ &= \frac{m}{2} \sum_l (\omega^2 + \omega_{nl}^2) x_{nl}^2. \end{aligned}$$

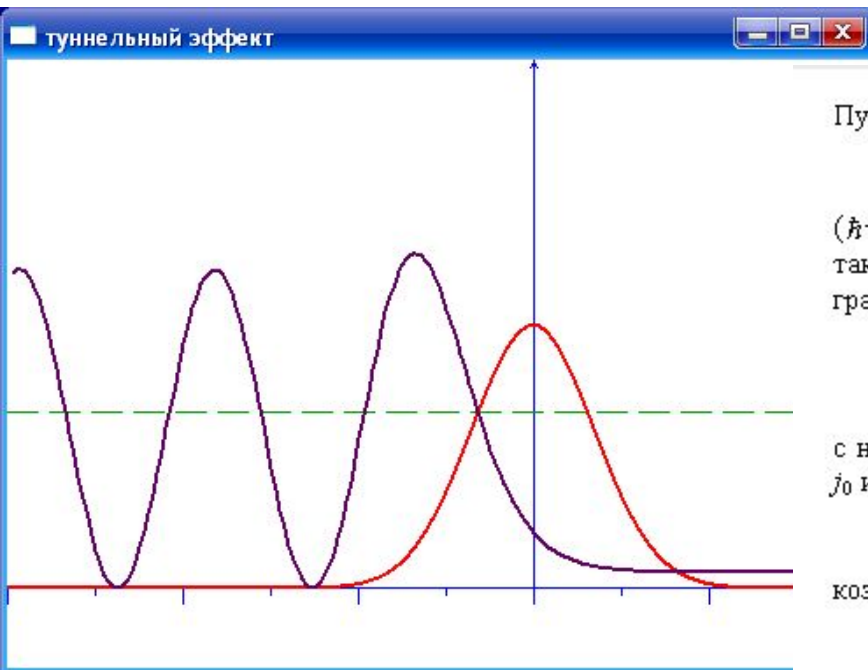
В сумме по l отличны от нуля только члены с $l=n \pm 1$; подставляя (25,4), получаем

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (25,5)$$

Вопрос 3

- Прохождение частиц через потенциальный барьер.
- Туннельный эффект.

Схема расчетов прохождения частиц через потенциальный барьер



Рассмотрим математическую модель одномерного туннельного эффекта. Пусть движущиеся вдоль оси x частицы массой m с энергией E

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad (\text{П8.1})$$

(\hbar – постоянная Планка) налетают (слева) на потенциальный барьер $U(x)$ такой, что $U \rightarrow 0$ при $x \rightarrow \pm\infty$. Комплексная волновая функция удовлетворяет граничным условиям

$$\psi(x) \rightarrow A \exp(ikx), \quad k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}, \quad x \rightarrow \infty, \quad (\text{П8.2})$$

$$\psi(x) \rightarrow \exp(ikx) + B \exp(-ikx), \quad x \rightarrow -\infty, \quad (\text{П8.3})$$

с неизвестными постоянными A и B . Потоки частиц слева и справа от барьера j_0 и j_1 составляют:

$$j_0 = \frac{\hbar k}{m}, \quad j_1 = \frac{\hbar k}{m} |A|^2, \quad (\text{П8.4})$$

коэффициент прохождения (прозрачность барьера) равен

$$D = \frac{j_1}{j_0} = |A|^2. \quad (\text{П8.5})$$

Исключение постоянных A и B дает граничные условия третьего рода:

$$\psi'(x) = ik\psi(x), \quad x \rightarrow \infty, \quad (\text{П8.6})$$

$$\begin{aligned} (\psi'(x) - ik \exp(ikx)) &= -ikB \exp(-ikx) = \\ &= -ik(\psi(x) - \exp(ikx)), \quad x \rightarrow -\infty, \end{aligned} \quad (\text{П8.7})$$

Таким образом, для уравнения Шредингера, записанного для удобства в виде

$$\psi''(x) + (\varepsilon - u(x))\psi(x) = 0, \quad \varepsilon = \frac{2mE}{\hbar^2} = k^2, \quad u(x) = \frac{2m}{\hbar^2} U(x), \quad (\text{П8.8})$$

следует решить третью краевую задачу. В компьютерной модели численное решение находится в узлах сетки

$$x_j = x_0 + jh, \quad \psi_j = \psi(x_j); \quad u_j = u(x_j), \quad j = 0, 1, \dots \quad (\text{П8.9})$$

Разностные аппроксимации уравнения (П8.8) и граничных условий (П8.6), (П8.7) приводят к системе линейных уравнений для неизвестных ψ_j . Матрица системы оказывается треугольной и ее решение легко находится стандартным методом прогонки [32]. Типичные результаты применения компьютерной модели показаны на рис. 16.13, 16.15, 17.12.

Туннельный эффект в устройствах с *p-n* переходом и резонансное туннелирование в стабилитроне

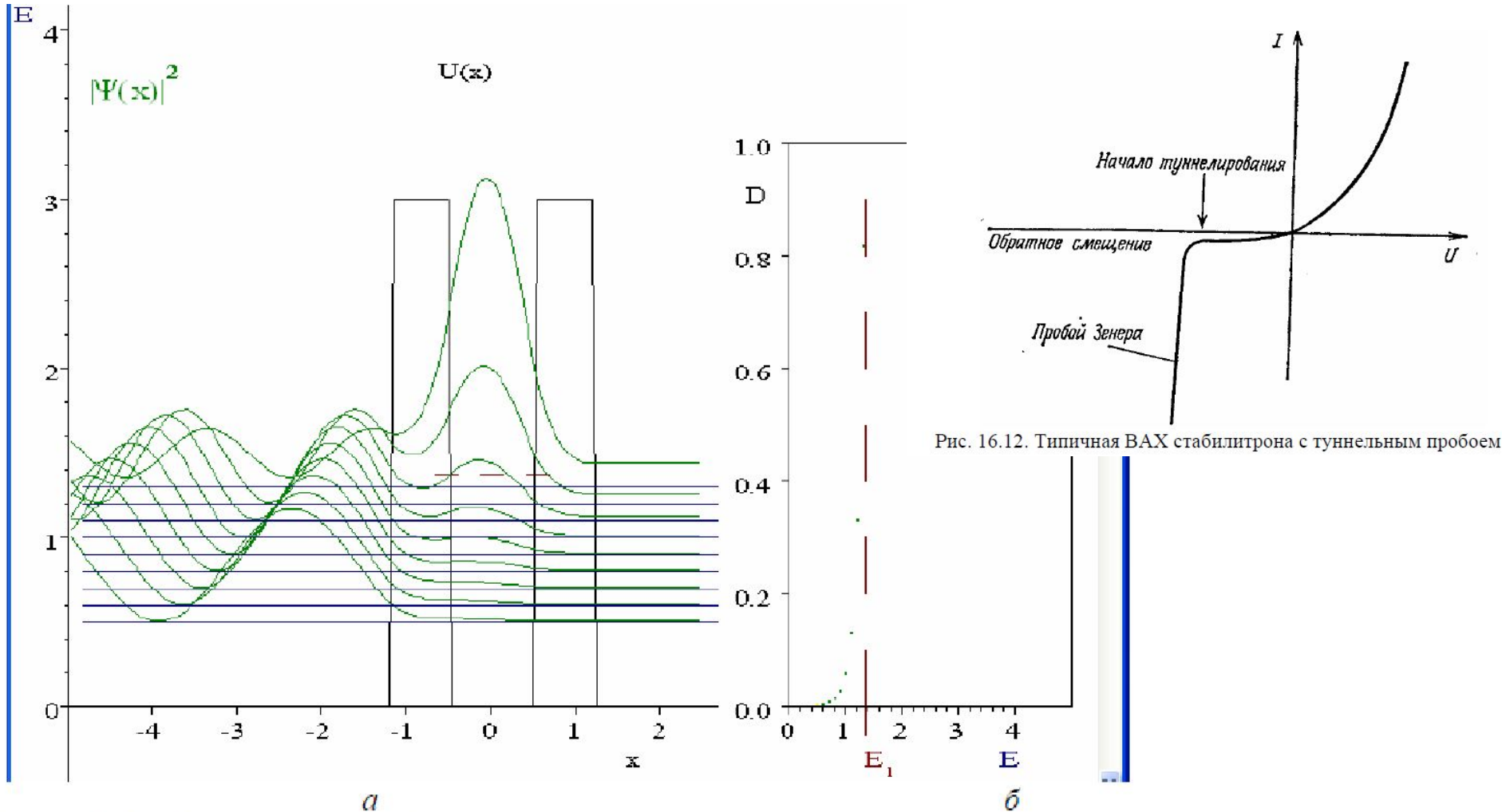
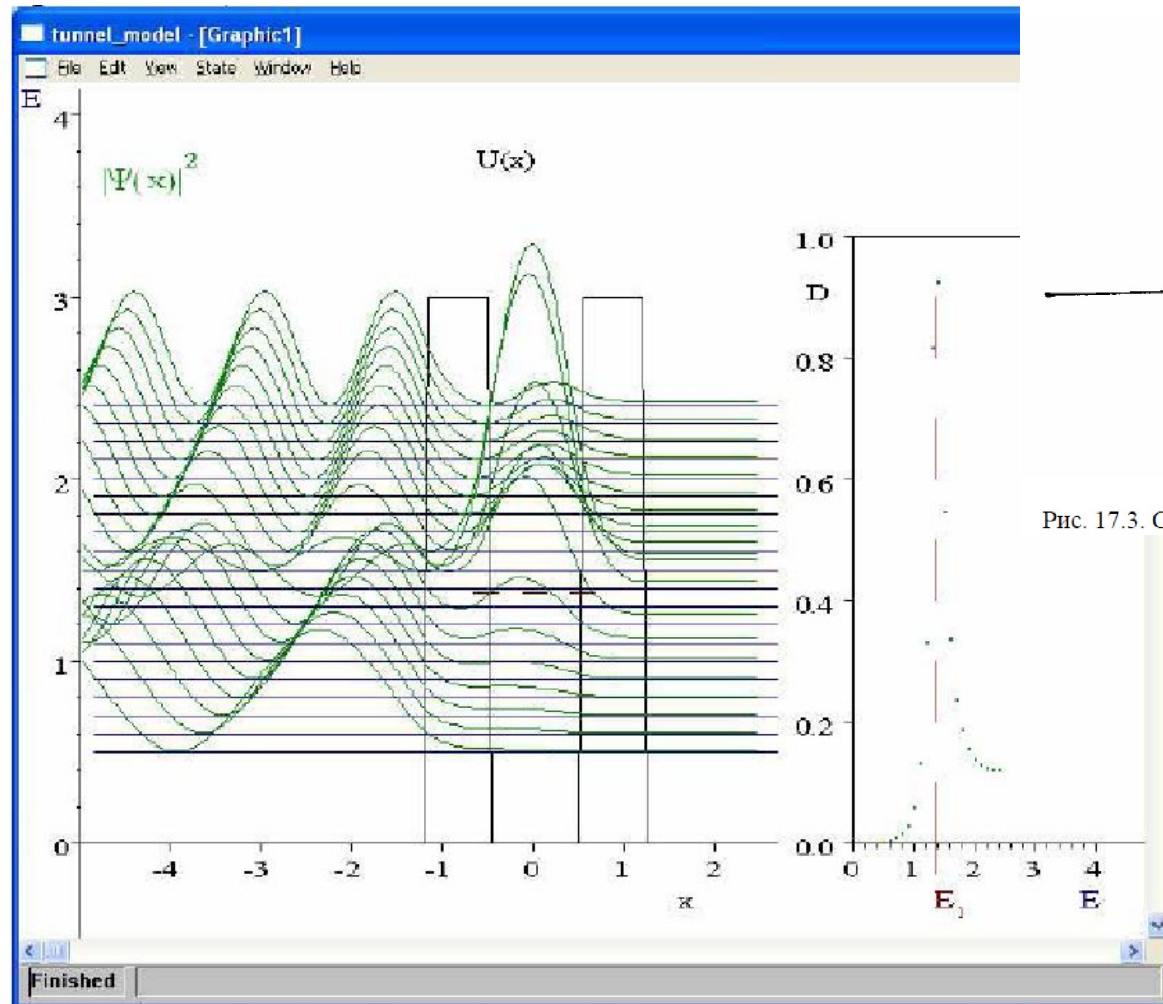


Рис. 16.12. Типичная ВАХ стабилитрона с туннельным пробоем

Рис. 16.15. Потенциальный барьер с потенциальной ямой, имеющей уровень энергии $E_1 \approx 1.4$, квадрат модуля волновой функции (а) и зависимость проходимости D барьера от энергии E (б)

Туннельный эффект в устройствах с *p-n* переходом и резонансное туннелирование в туннельном диоде



a

б

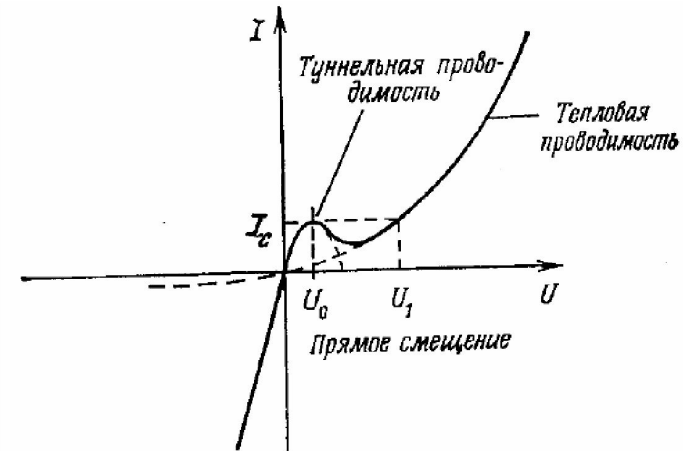


Рис. 17.3. Схематичное изображение ВАХ туннельного диода

Рис. 17.11. Потенциальный барьер с потенциальной ямой, имеющей уровень энергии $E_1 \approx 1,4$, квадрат модуля волновой функции (*a*) и зависимость проницаемости D барьера от энергии E (*б*)

Туннельный эффект при альфа-распаде

NRV: α -decay

Description

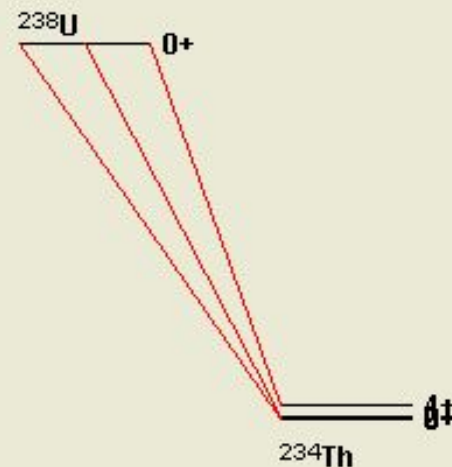
Nucleus U 238 | 0 | P +1 | Q_0 4269.76 keV Refresh

The process is $^{238}\text{U} \rightarrow ^{234}\text{Th} + \alpha$

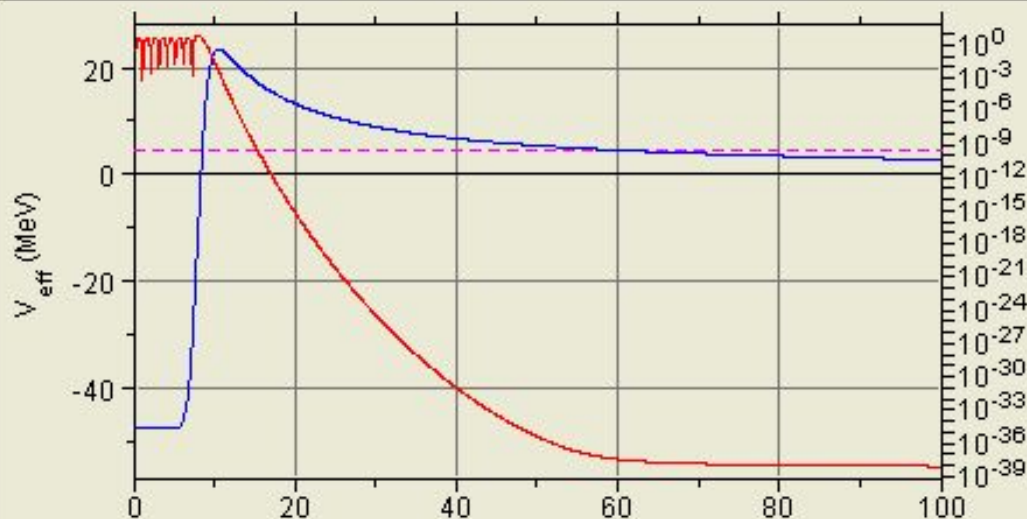
Experimental α -decay chain

Decay scheme

Q-value	4.27 MeV
$T_{1/2}$ (exp.)	$4.47 \cdot 10^9$ y
$T_{1/2}$ (WKB)	$5.62 \cdot 10^9$ y
$T_{1/2}$ [1,2]	$6.86 \cdot 10^9$ y
$T_{1/2}$ [1,3]	$7.06 \cdot 10^9$ y
$T_{1/2}$ [4]	$3.84 \cdot 10^9$ y



Effective potential and turning points ($Q=4.27$ MeV)



Parameters

Woods-Saxon Potential:

$V_0 = -91.55$ MeV

$r_0 = 1.27$ fm

$R = 7.83$ fm

$a = 0.65$ fm

Alpha particle angular momentum:

$L = 0$

Туннельный эффект при альфа-распаде и квазистационарные состояния

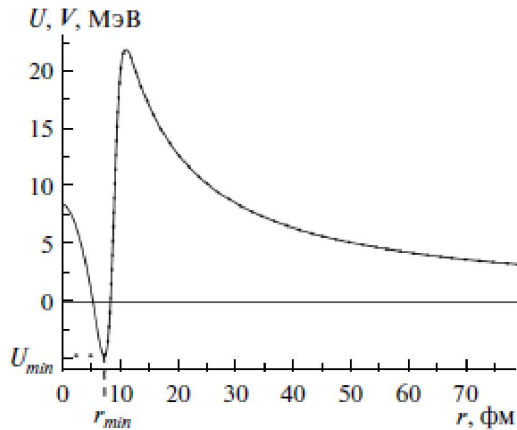


Рис. 1. Потенциальные энергии альфа-частицы в ядре ^{238}U в модели с поверхностной $U(r)$ (сплошная кривая) и объемной $V(r)$ (9) (точечная кривая) кластерными областями для углового момента $L = 0$.

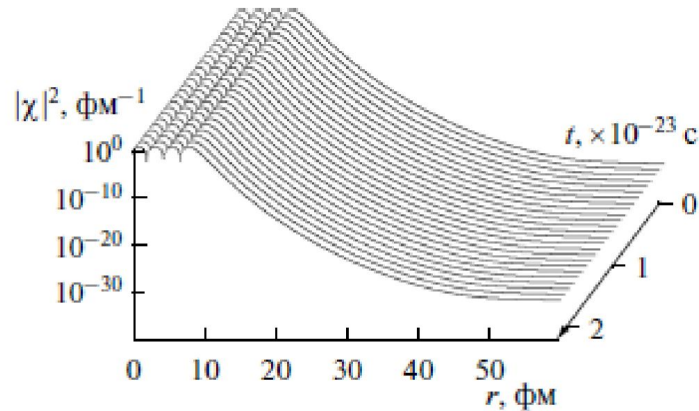


Рис. 3. Плотность вероятности $|\chi(r,t)|^2$ квазистационарного состояния альфа-частицы в ядре урана в модели объемной кластерной области для углового момента $L = 0$.

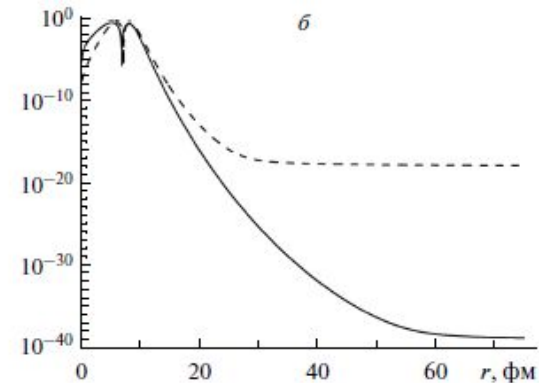


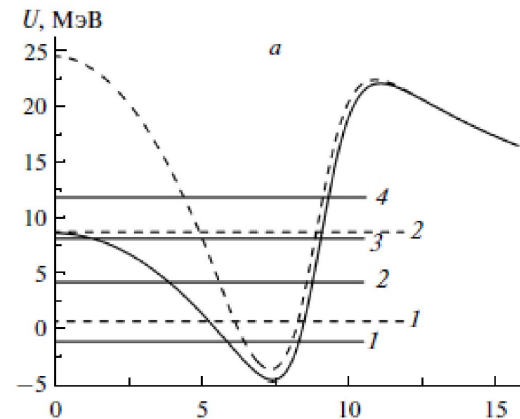
Рис. 5. Плотность вероятности $|\chi(r)|^2$ для квазистационарного состояния альфа-частицы с номером $n = 2$ и $L = 0$ в ядре ^{238}U (сплошные кривые) и ^{224}U (штриховые кривые) в модели с поверхностной кластерной областью.

В. В. Самарин ИЗВЕСТИЯ РАН. СЕРИЯ ФИЗИЧЕСКАЯ, 2014, том 78, № 11

Соотношение неопределенности для энергии

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar$$

Δt – время жизни состояния (характерное время распада),
 ΔE – неопределенность энергии состояния



Прохождение частиц через потенциальный барьер.

Точное решение уравнения Шредингера для потенциального барьера Пешля-Теллера

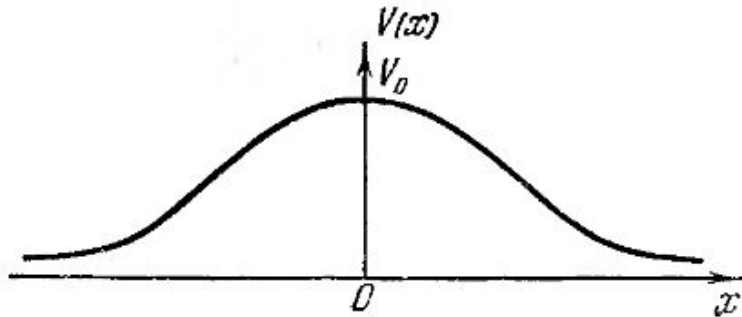


Рис. 9.

5. Вычислить коэффициент прохождения через потенциальный барьер $V(x) = \frac{V_0}{\text{ch}^2 \frac{x}{a}}$ (рис. 9) потока частиц, движущихся с энергией $E < V_0$.

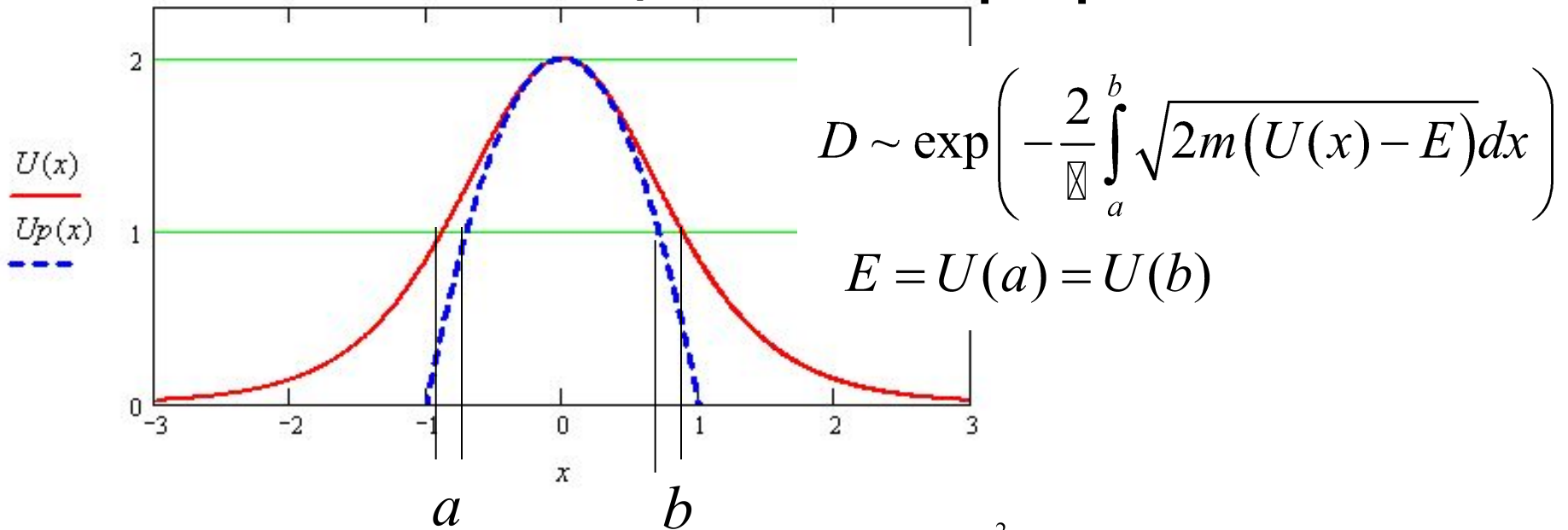
Подставляя в последнее выражение значения коэффициентов A_1, A_2, B_1, B_2 и производя несложные преобразования, получим окончательно:

$$D = \frac{\text{sh}^2 \pi ka}{\text{sh}^2 \pi ka + \cos^2 \left(\frac{\pi}{2} \sqrt{1 - \frac{8\mu V_0 a^2}{\hbar^2}} \right)}, \quad \text{если } \frac{8\mu V_0 a^2}{\hbar^2} < 1$$

и

$$D = \frac{\text{sh}^2 \pi ka}{\text{sh}^2 \pi ka + \text{ch}^2 \left(\frac{\pi}{2} \sqrt{\frac{8\mu V_0 a^2}{\hbar^2} - 1} \right)}, \quad \text{если } \frac{8\mu V_0 a^2}{\hbar^2} > 1.$$

Квазиклассическая формула для проницаемости потенциального барьера



формула для параболического барьера $U(x) = B - \frac{m\omega^2}{2} x^2$

$$\begin{aligned}
 D &= \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_a^b \sqrt{2m\left(B - E - \frac{m\omega^2}{2} x^2\right)} dx\right) = \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(B - E)} \int_a^b \sqrt{\left(1 - \frac{m\omega^2}{2(B - E)} x^2\right)} dx\right) = \\
 &= \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(B - E)} \sqrt{\frac{(B - E)}{m\omega^2}} \int_{-1}^1 \sqrt{(1 - y^2)} dy\right) = \exp\left(-\frac{2\pi}{\hbar\omega} (B - E)\right), \quad E < B
 \end{aligned}$$

Прохождение частиц через потенциальный барьер.

1. Single-Barrier Penetration Model

<http://nrv.jinr.ru/nrv/webnrv/fusion/description/empiric.pdf>

Приближенная формула для параболического барьера

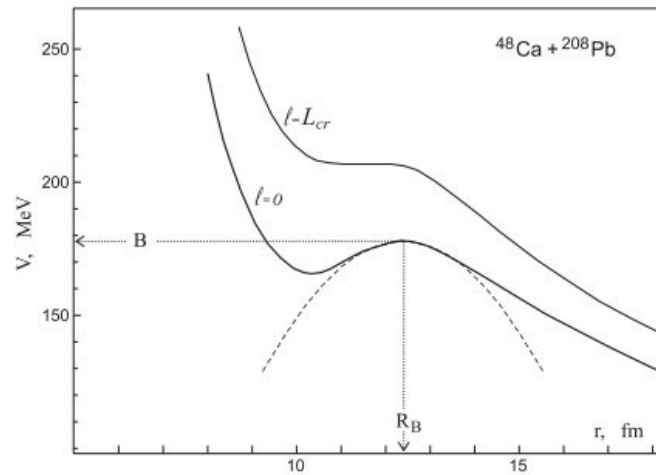


Figure 1 Interaction of two spherical nuclei $^{48}\text{Ca} + ^{208}\text{Pb}$. The proximity potential is used here for the nuclear interaction ($r_0=1.16$ fm, $b=1.0$ fm). Dashed curve shows the parabolic approximation of the Coulomb barrier. For the partial wave $l=L_{cr}$ (thin solid line) the potential pocket disappears.

where μ is the reduced mass of the system, E is the center-of-mass energy, and $T_l(E)$ is the partial barrier transmission probabilities. Within the “**single-barrier penetration model**” transmission probabilities $T_l(E)$ can be calculated by solving one-dimensional Schrödinger equation with appropriate (non-reflective) boundary condition. Approximating the radial dependence of the barrier by a parabola one can use the simple Hill-Wheeler formula [1] for the transmission probabilities

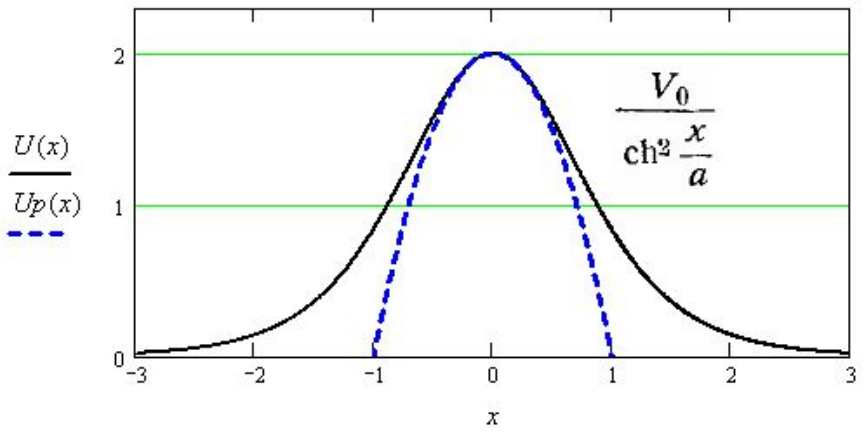
$$T_l^{HW}(B; E) = \left[1 + \exp \left(\frac{2\pi}{\hbar\omega_B(l)} \left[B + \frac{\hbar^2}{2\mu R_B^2(l)} l(l+1) - E \right] \right) \right]^{-1}. \quad (2)$$

Here $\hbar\omega_B = \sqrt{\hbar^2 / \mu \left| \partial^2 V / \partial r^2 \right|_B}$ is defined by the width of the potential barrier, B is the

height of the barrier and $R_B(l)$ is the position of the effective barrier including a centrifugal term. Better agreement with experimental data on sub-barrier fusion cross section can be obtained if energy dependence of the barrier width, $\hbar\omega_B(E)$, is taken into account (See Fig. 1).

$$\hbar\omega_B(l)$$

Приближенная формула для проницаемости параболического барьера



$$D = \frac{\text{sh}^2 \pi ka}{\text{sh}^2 \pi ka + \text{ch}^2 \left(\frac{\pi}{2} \sqrt{\frac{8\mu V_0 a^2}{\hbar^2} - 1} \right)},$$

если $\frac{8\mu V_0 a^2}{\hbar^2} > 1$.

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}; \quad k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE};$$

$$V_0 = B = \frac{\hbar^2 Q^2}{2m}; \quad Q = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mB}; \quad \sqrt{\frac{8mBa^2}{\hbar^2}} = 2Qa;$$

$$U(x) = \frac{B}{\text{ch}^2 \frac{x}{a}} \approx B \left(1 - \frac{x^2}{a^2} \right) = B - \frac{m\omega^2}{2} x^2; \quad a^2 = \frac{2B}{m\omega^2};$$

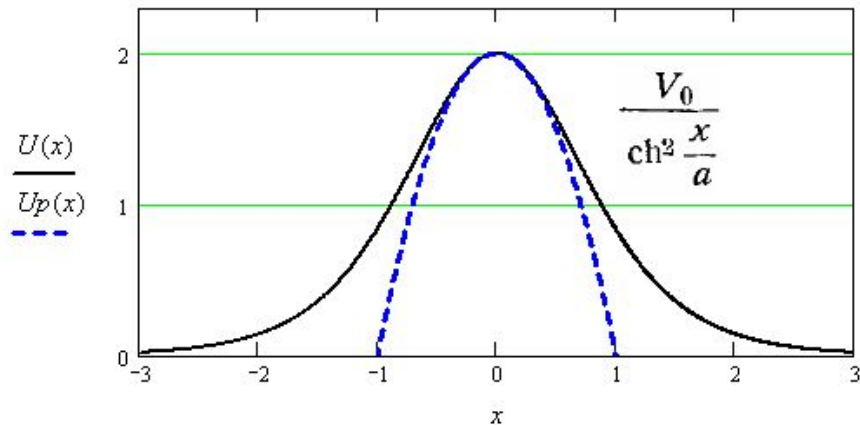
$$D \approx \left[1 + \frac{\text{ch}^2 \pi Qa}{\text{sh}^2 \pi ka} \right]^{-1} = \left[1 + \frac{\text{ch}^2 \pi \frac{2B}{\hbar\omega}}{\text{sh}^2 \pi \frac{2\sqrt{EB}}{\hbar\omega}} \right]^{-1};$$

$$ka = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE} \sqrt{\frac{2B}{m\omega^2}} = \frac{2\sqrt{EB}}{\hbar\omega}; \quad Qa = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mB} \sqrt{\frac{2B}{m\omega^2}} = \frac{2B}{\hbar\omega}$$

$$\ln \frac{\text{ch}^2 2\pi \frac{B}{\hbar\omega}}{\text{sh}^2 2\pi \frac{\sqrt{EB}}{\hbar\omega}} = -2 \ln \frac{\text{ch} 2\pi \frac{\sqrt{EB}}{\hbar\omega}}{\text{sh} 2\pi \frac{B}{\hbar\omega}} \approx -2 \ln \exp \left(\frac{2\pi}{\hbar\omega} (\sqrt{EB} - B) \right) = -2 \frac{2\pi\sqrt{EB}}{\hbar\omega} (\sqrt{E} - \sqrt{B}) = -2 \frac{2\pi\sqrt{B}}{\hbar\omega} \frac{(E - B)}{(\sqrt{E} + \sqrt{B})} \approx -\frac{2\pi}{\hbar\omega} (E - B)$$

$$\frac{\text{ch}^2 2\pi \frac{B}{\hbar\omega}}{\text{sh}^2 2\pi \frac{\sqrt{EB}}{\hbar\omega}} \approx \exp \left(\frac{2\pi}{\hbar\omega} (B - E) \right) \quad T^{HW}(B; E) = \left[1 + \exp \left(\frac{2\pi}{\hbar\omega_B} [B - E] \right) \right]^{-1} \cdot \hbar\omega_B = \sqrt{\hbar^2 / \mu \left| \partial^2 V / \partial r^2 \right|_B}$$

Пример сравнения точной и приближенных формул для проницаемости барьера



$$C := \frac{8 \cdot m \cdot B \cdot a^2}{\hbar^2} \quad C = 16 \quad D(E) := \frac{1}{1 + \frac{\left(\cosh\left(\frac{\pi}{2} \cdot \sqrt{C-1}\right) \right)^2}{\left(\sinh\left(\pi \cdot a \cdot \sqrt{2 \cdot m \cdot E}\right) \right)^2}}$$

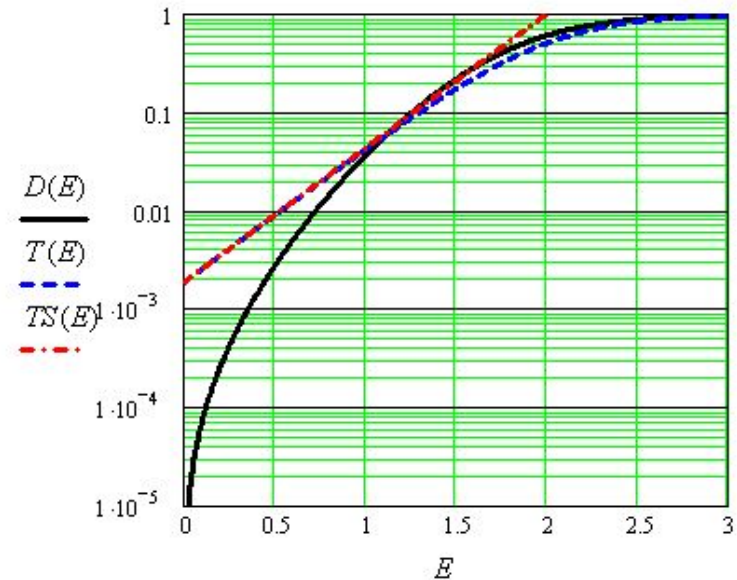
$$\hbar \omega := \sqrt{2 \cdot \frac{B}{m} \cdot \frac{1}{a}} \quad \hbar \omega = 2 \quad B = 2 \quad a = 1 \quad m = 1 \quad \hbar = 1$$

$$T(E) := \left[1 + \exp\left[2 \cdot \frac{\pi}{\hbar \omega} \cdot (B - E)\right] \right]^{-1} \quad TS(E) := \exp\left[-2 \cdot \frac{\pi}{\hbar \omega} \cdot (B - E)\right]$$

Точная формула

Приближение Хилла-Уилера

Квазиклассическое приближение для параболического барьера



Литература

1. Ландау Л.Д. Лифшиц Е.М. Краткий курс теоретической физики. Т. 2. Квантовая механика. – М. Наука. 1971.
2. Ситенко А.Г. Теория рассеяния. – Киев. “Вища школа”, 1975.
3. Фрауэнфельдер, Г. Субатомная физика. /Г. Фрауэнфельдер, Э. Хэнли. – М.: Мир. 1979.
4. Nuclear Reaction Video. База знаний по низкоэнергетическим ядерным реакциям. <http://nrv.jinr.ru/nrv/>.
5. Гольдман И. И., Кривченков В. Д. Сборник задач по квантовой механике. (ГИТТЛ, Москва, 1957).