

Омский государственный технический университет

Кафедра физики

Калистратова Л.Ф.

**Электронные лекции по разделам оптики,
квантовой механики, атомной и ядерной физики**

9 лекций

(18 аудиторных часов)

Лекция 6. Основы квантовой механики

План лекции

6.1. Уравнение Шредингера.

6.2. Волновая функция и её свойства.

6.3. Движение свободной частицы.

6.4. Микрочастица в одномерной потенциальной яме.

6.5. Туннельный эффект.

6.1. Уравнение Шредингера

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).

Справедливость **уравнения Шредингера** (записано в 1926 году) доказывается тем, что все вытекающие из него следствия точно согласуются с опытными фактами.

1. Масса микрочастицы - **m** : определяет её корпускулярные свойства.

2. Потенциальная энергия $U(x, y, z, t)$: определяет взаимодействие частицы с силовым полем.

В общем случае она зависит от координат микрочастицы и от времени.

3. «Пси»-функция $\Psi(x, y, z, t)$: определяет волновые свойства микрочастицы.

- является также функцией координат и времени.

Вид Ψ - функции определяется потенциальной энергией, то есть, характером тех сил, которые действуют на частицу.

Нестационарными называются состояния микрочастицы, в которых потенциальная энергия зависит и от координат и от времени:

$$U = U(x, y, z, t)$$

Уравнение Шредингера для нестационарных состояний записывается как

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + U \Psi = i \hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

Здесь

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

- оператор Лапласа.

Стационарными называются состояния микрочастицы, в которых её потенциальная энергия не зависит от времени и является функцией только координат:

$$U = U(x, y, z)$$

Уравнение Шредингера для стационарных состояний (без вывода):

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

E – **полная энергия** микрочастицы.

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?

$$\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_n$$

3. В какой точке силового поля локализована микрочастица?

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

6.2. Волновая функция и её свойства

Особенностью квантово-механического описания поведения микрочастиц является **вероятностный подход**.

Вероятностной является причинно – следственная связь между событиями микрочастицы.

При этом изменяется не сама вероятность поведения микрочастицы, а величина, названная **амплитудой вероятности** или «пси»-функцией.

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

Волновая функция описывает волновые свойства частиц.

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.

5. **Первые и вторые производные от волновой функции** должны быть также непрерывными.

Из уравнения Шредингера и из условий, налагаемых на волновую функцию, непосредственно вытекают **правила квантования**.

Решения уравнения Шредингера существуют не при любых, а только при **некоторых значениях величин**, получивших название **собственных значений**.

Собственные значения полной энергии образуют **дискретный энергетический спектр** микрочастицы:

$$E_1, E_2, E_3 \dots$$

Собственным значениям энергии микрочастицы
соответствуют **собственные волновые функции**.

$$\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3 \dots$$

Далее можно найти **вероятность нахождения
частицы в различных точках пространства**:

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

Нахождение собственных значений всех величин
представляет весьма **трудную математическую
задачу**.

6.3. 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** ($E = E_k + U$) 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,

$$\frac{d^2 x}{dt^2} + \omega^2 x = 0$$

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 $\left\langle \sin^2 x \right\rangle = \frac{1}{2}$, 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:

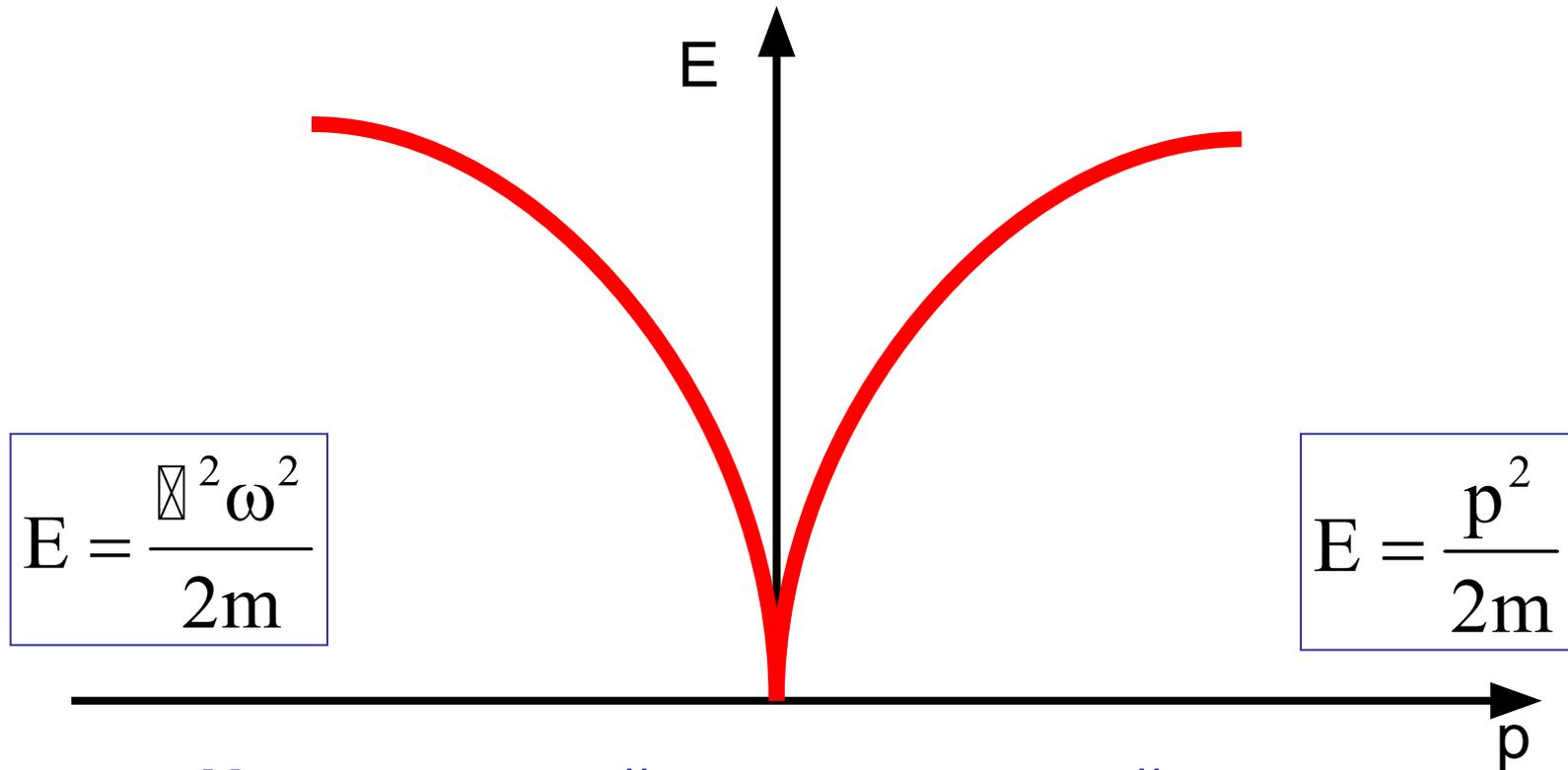
$$E = \frac{\hbar^2 \omega^2}{2m}$$

$$p = \hbar \omega$$

Поскольку частота волновой функции ω может принимать любые положительные значения, то **импульс p и энергия E частицы принимают любые значения.**

Энергетический спектр свободной частицы является **непрерывным.**

Зависимость полной энергии от импульса (равнозначно от частоты)



Непрерывный энергетический спектр

6.4. Частица в одномерной потенциальной яме

Потенциальной ямой называется область пространства, в которой частица будет находиться, имея заданное значение полной энергии E .

Исследуем поведение микрочастицы в бесконечно глубокой одномерной потенциальной яме.

Взаимодействие частицы с силовым полем определяет потенциальная энергия $U(x, y, z, t)$.

Рассмотрим частицу массой m в таком силовом поле, в котором **потенциальная энергия U** :

- **зависит только от одной координаты** (одномерный случай движения);
- **не зависит от времени** (стационарные состояния частицы).

В данном случае частица может двигаться только вдоль оси x .

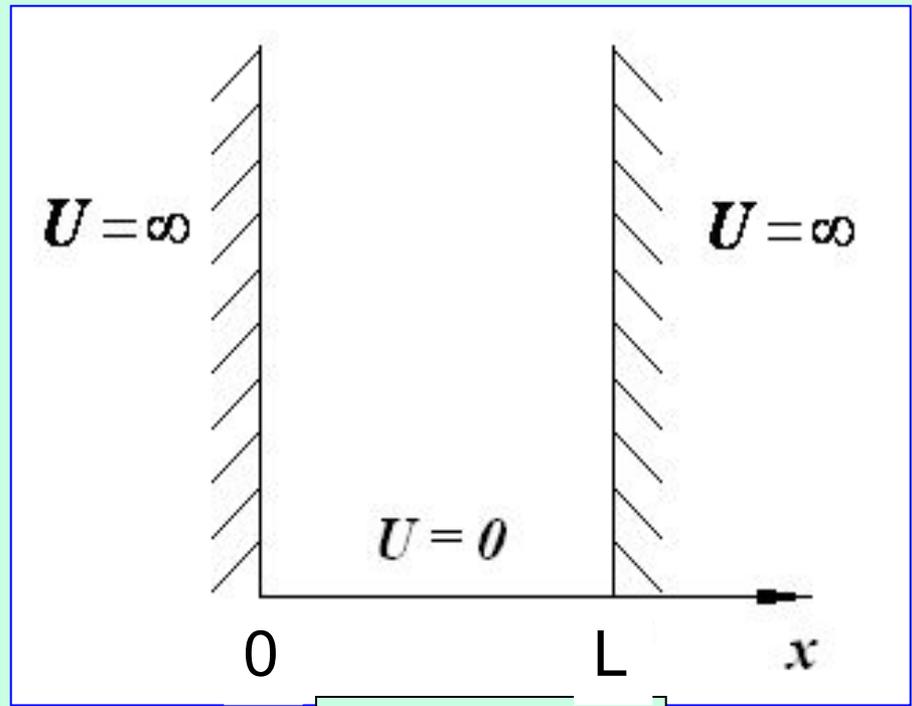
Пусть движение ограничено непроницаемыми для частицы стенками: **$x = 0$** и **$x = L$** .

L – ширина потенциальной ямы.

Потенциальная энергия микрочастицы:

$U = 0$ при $0 \leq x \leq L$

$U = \infty$ при $x < 0$ $x \geq L$



Уравнение Шредингера для стационарных состояний будет иметь вид:

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

За пределы потенциальной ямы частица попасть не может, поэтому **вероятность обнаружить эту частицу за пределами ямы равна нулю.**

Тогда и **волновая функция ψ за пределами ямы равна нулю.**

Граничные условия:

- определяют те условия, которым должны удовлетворять **решения** уравнения Шредингера, **имеющие физический смысл**.
- они вытекают из **условия непрерывности волновой функции ψ** .

ψ **должна быть равна нулю** не только за пределами ямы, но и **на границах ямы**.

Граничные условия для волновой функции микрочастицы, находящейся в потенциальной одномерной яме:

$$\psi(0) = 0$$

$$\psi(L) = 0$$

В области между 0 и L потенциальная энергия

$U = 0$, но волновая функция $\psi \neq 0$.

Уравнение Шредингера примет вид:

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

Введём обозначение

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

и перепишем уравнение Шредингера.

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \omega^2 \psi = 0$$

Этот вид уравнения хорошо известен в теории колебаний как дифференциальное уравнение для собственных колебаний осциллятора.

Его решением является выражение для волновой функции:

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

Применим к этому выражению **граничные условия**.

1. Из **первого условия** $\psi(0) = 0$ получаем:

$$\psi(0) = \psi_0 \sin \alpha = 0 \quad .$$

$$\sin \alpha = 0$$

Отсюда следует, что постоянная величина

$$\alpha = 0 \quad .$$

2. Из второго условия $\psi(L) = 0$ следует:

$$\psi(L) = \psi_0 \sin \omega L = 0$$

Это возможно только, если

$$\omega L = \pm n\pi$$

параметр $n = 1, 2, 3, \dots$

Значение $n = 0$ отпадает, поскольку при этом частица в потенциальной яме не находится, что противоречит условию задачи.

Решения уравнения Шредингера будут иметь **физический смысл** не при всех значениях энергии , а лишь при значениях, удовлетворяющих соотношению:

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

Таким образом, мы получили **собственные значения полной энергии** в виде **дискретного ряда**:

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2 \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

Особенности энергетического спектра

1. **Полная энергия** частицы **положительная** ($E > 0$).
2. **Полная энергия квантуется**: принимает дискретный набор значений, причём

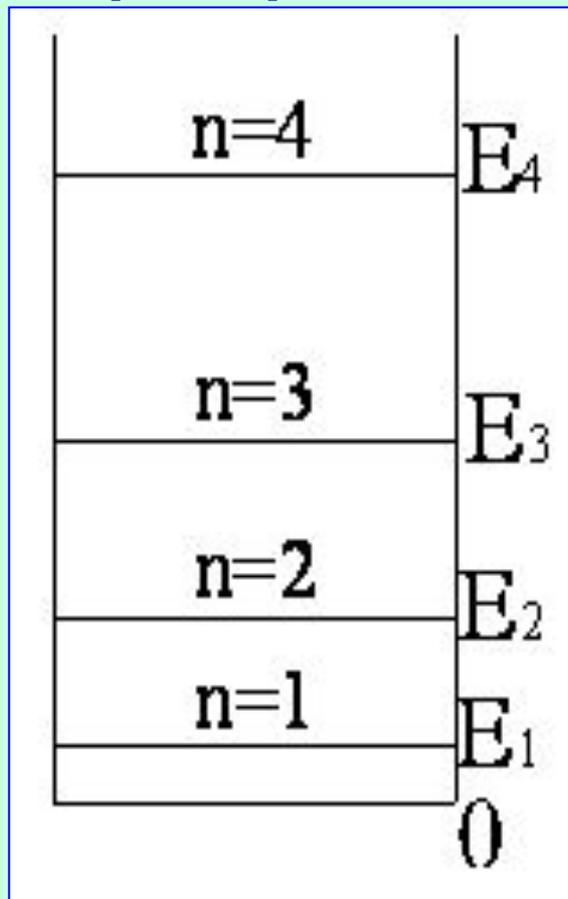
$$E_n = n^2 E_1$$

Энергия первого (**основного**) состояния:

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

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

Разность энергий двух соседних уровней **пропорциональна числу n:**



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

При $n \gg 1$

$$\Delta E_n \approx \frac{\pi^2 \hbar^2}{mL^2} n$$

Произведем оценку расстояний между соседними уровнями для различных значений массы частицы m и ширины ямы L .

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

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

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

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



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

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

Амплитуда волновой функции

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

Окончательно **волновые функции** запишутся как

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

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

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

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

получим выражение для

длины волны де Бройля:

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

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

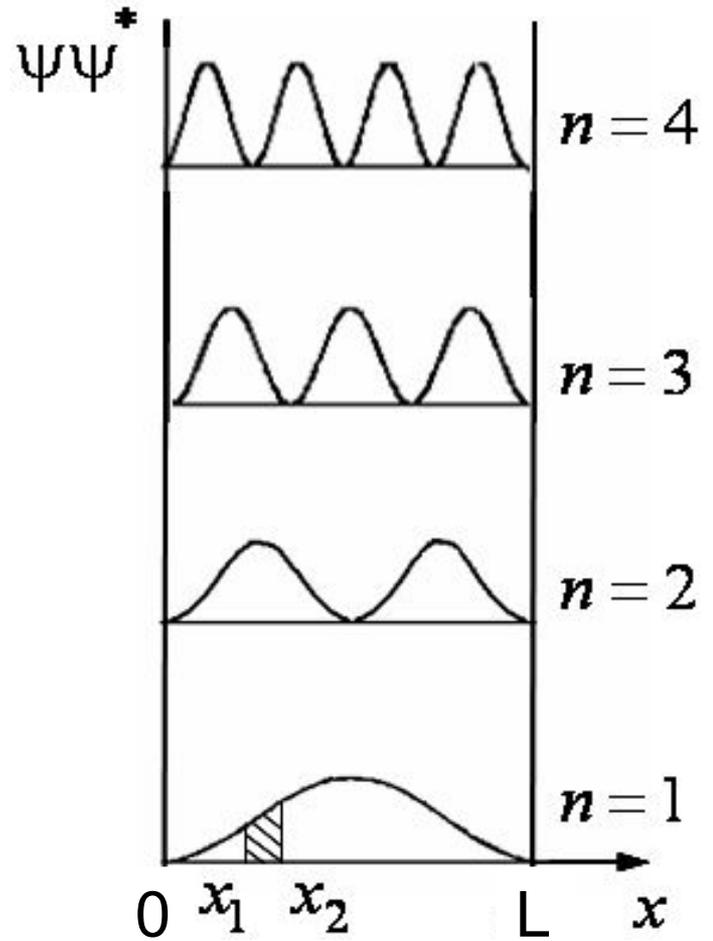
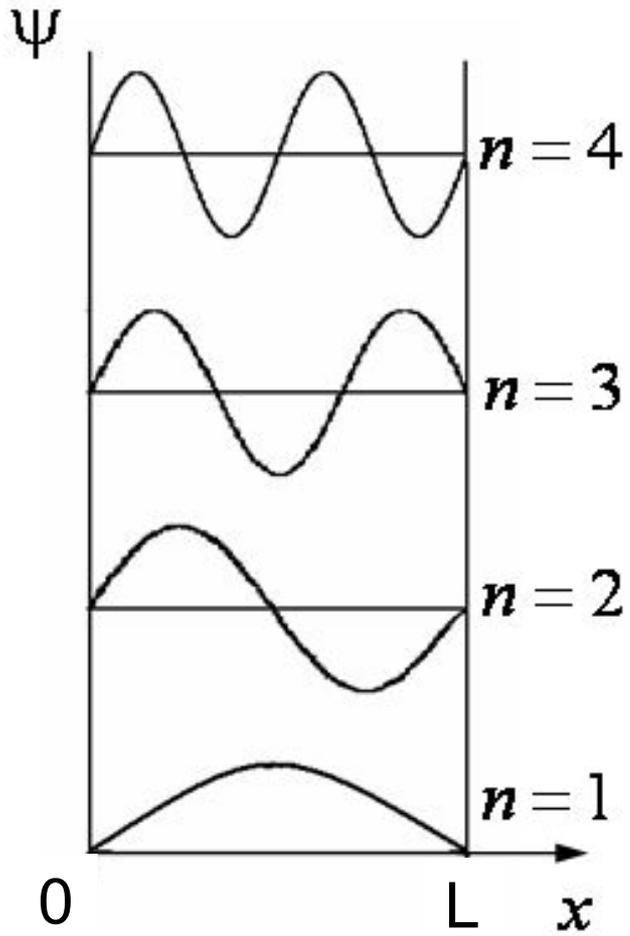
$$|\psi_n|^2 = \frac{2}{L} \sin^2 \frac{n\pi x}{L} .$$

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

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

Графики функций

$\psi(x)$ и $|\psi(x)|^2$



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 ;

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

- имеет **длину волны де Бройля**

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

- на ширине ямы укладывается **половина длины волны де Бройля** частицы;

- вероятнее всего будет находиться **в середине ямы** с координатой $x = L/2$.

2. При $n = 2$ (первое возбуждённое состояние).

Микрочастица

- имеет **энергию** E_2 $E_2 = 4E_1$;

- имеет **длину волны де Бройля**

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

- на ширине ямы укладывается **целая длина волны де Бройля**;

- частица с одинаковой вероятностью может находиться **в двух точках потенциальной ямы** с координатами $x_1 = L/4$ и $x_2 = 3L/4$.

3. Если **частицу возбудить до высоких энергий** ($n \rightarrow \infty$), 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**.

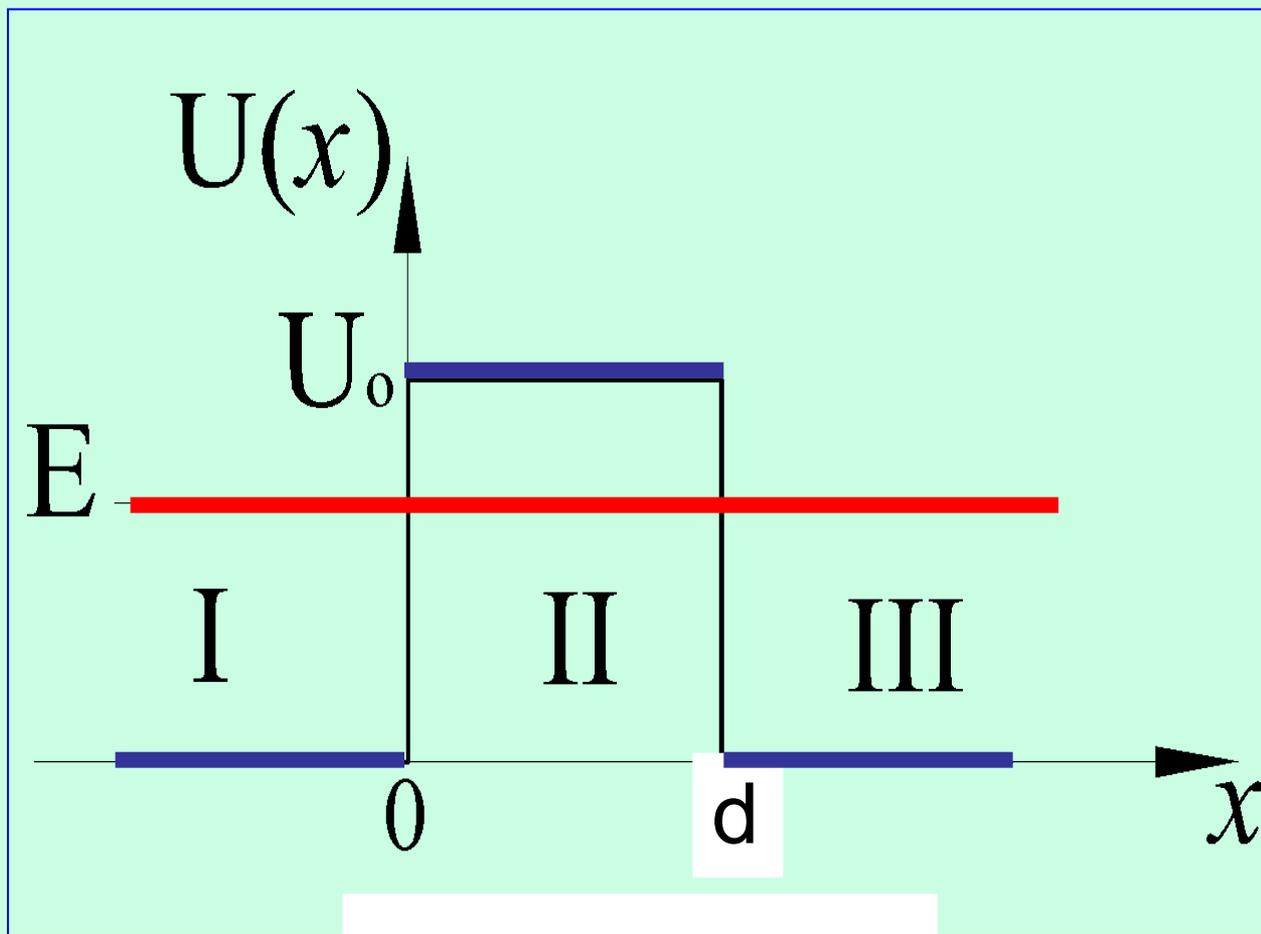
6.5. Туннельный эффект

Потенциальным барьером называется область пространства, в которой частица не может находиться, имея данную энергию E .

Туннельный эффект:

- явление прохождения частиц через потенциальный барьер;
- явление чисто квантовое, не имеющее аналога в классической физике.

Одномерный потенциальный барьер с прямоугольными стенками



Пусть частица, движущаяся слева направо, встречает на своем пути **потенциальный барьер**:

- высотой U_0 ;
- шириной d .

По **классическим представлениям** поведение частицы имеет следующий характер:

- если энергия частицы больше высоты барьера ($E > U_0$), то она беспрепятственно проходит над барьером;
- на участке $0 \leq x \leq d$ лишь уменьшается скорость частицы, но затем, при $x > d$ снова принимает первоначальное значение;

- если же $E < U_0$, то частица отражается от барьера и летит в обратную сторону.

Классическая частица сквозь барьер проникнуть не может.

В области потенциального барьера полная энергия частицы меньше потенциальной энергии:

$$E < U_0.$$

Как известно, полная энергия равна сумме кинетической и потенциальной энергий: $E = E_k + U$.

Тогда **кинетическая энергия классической частицы** в области потенциального барьера должна быть **отрицательной**:

$$E_k < 0.$$

Этого не может быть с точки зрения классической физики.

Совершенно иначе выглядит поведение частицы согласно **квантовой механике**.

Во - первых, даже при $E > U_0$ имеется отличная от нуля вероятность того, что частица отразится от барьера и полетит в обратную сторону.

Во - вторых, при $E < U_0$ имеется отличная от нуля вероятность того, что частица проникнет «сквозь» барьер и окажется в области, где $x > d$.

Такое совершенно невозможное с классической точки зрения поведение микрочастиц вытекает непосредственно из уравнения Шредингера.

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

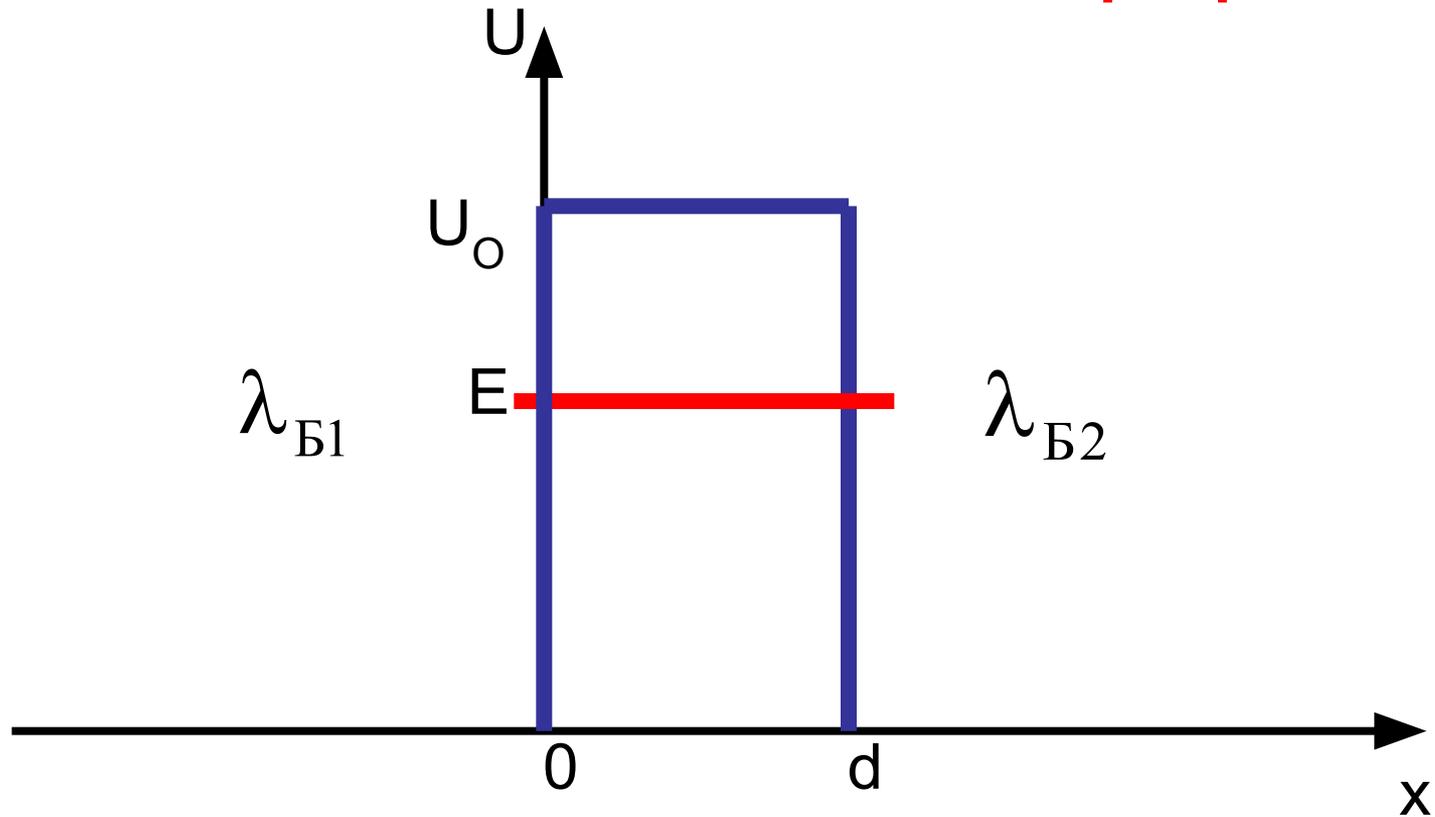
$$E - U_0 < 0$$

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 $U_0 - E$.**

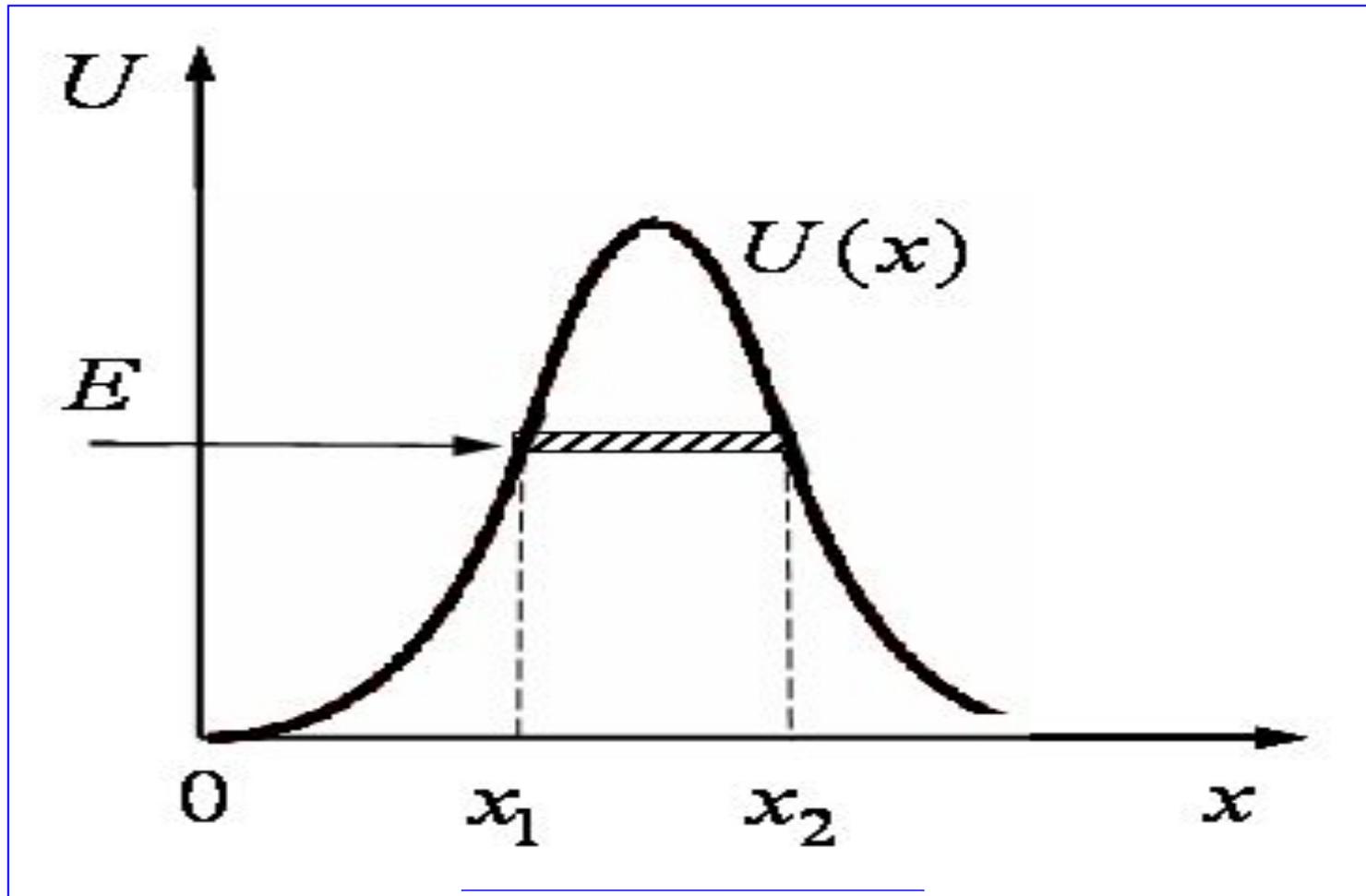
Коэффициент прозрачности сильно уменьшается
при увеличении массы частицы m .

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.**

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.**