ЛЕКЦИЯ 8

ПЛАН ЛЕКЦИИ

1. Гармонический квантовый осциллятор.
2. Прохождение частицы через потенциальный барьер. Туннельный эффект.

ГАРМОНИЧЕСКИЙ КВАНТОВЫЙ ОСЦИЛЛЯТОР.

Сведения о гармоническом осцилляторе из курса классической физики:

Любую колебательную систему называют *осциллятором*. Если поведение осциллятора подчиняется гармоническому закону, то это *гармонический осциллятор*.

Дифференциальное *уравнение гармонических колебаний* записывается в виде

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \omega_0^2 x = 0, \text{ его решение - } \quad x = A\cos(\omega_0 t + \varphi).$$

Часто для простоты рассматривают *одномерный* гармонический осциллятор.

Одномерным гармоническим осциллятором называют частицу массой m, совершающую одномерное движение под действием упругой силы $F = -kx$.

ГАРМОНИЧЕСКИЙ КВАНТОВЫЙ ОСЦИЛЛЯТОР.

Упругая сила удерживает частицу в окрестности положения равновесия, всегда направлена в сторону положения равновесия и пропорциональна отклонению частицы от положения равновесия.

Все это означает наличие *потенциальной ямы* для частицы, причем дно этой ямы находится как раз в точке равновесия.

Выражение для потенциальной энергии такой частицы имеет вид:

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

Собственная частота классического гармонического осциллятора равна $\omega = \sqrt{k/m}$. Выразив отсюда k, получим

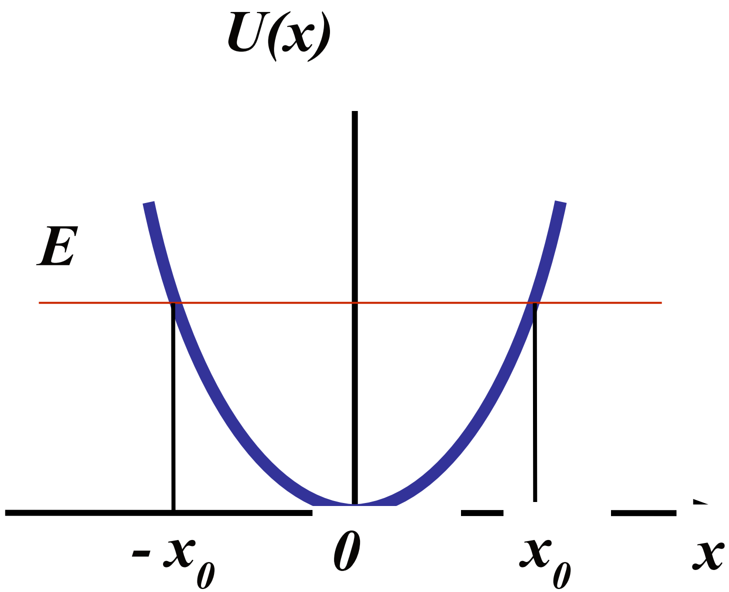
$$U = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$$

Это уравнение параболы.

Следовательно, классический одномерный гармонический осциллятор – это частица, совершающая колебания в *параболической бесконечно глубокой потенциальной яме* между точками с координатами x_0 и $-x_0$ - точками поворота.

ГАРМОНИЧЕСКИЙ КВАНТОВЫЙ ОСЦИЛЛЯТОР.

Рассмотрим поведение микрочастицы в такой потенциальной яме – *гармонический квантовый осциллятор.*



Поведение микрочастицы описывается волновой функцией.

Будем считать, что упругая среда стационарна.

Это значит, что коэффициент упругости среды ***k*** есть константа, не зависящая от времени.

Тогда возможны стационарные состояния частицы, которые интересно рассмотреть.

С учетом уравнения для потенциальной энергии запишем одномерное стационарное уравнение Шредингера в виде:

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

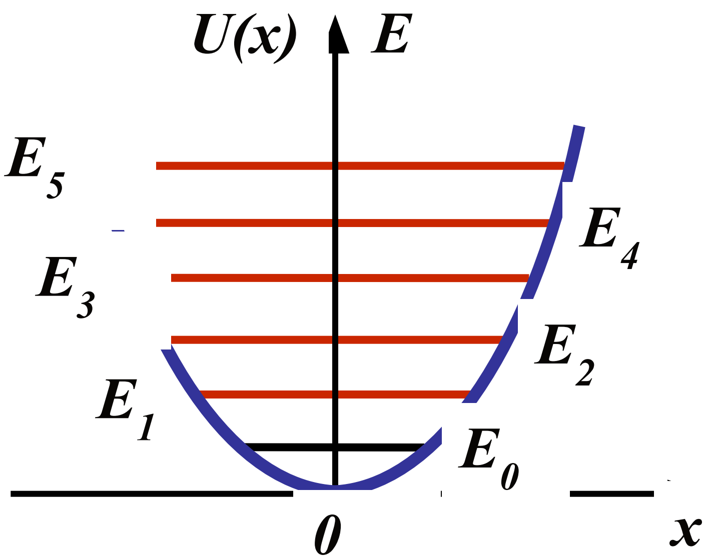
E – полная энергия осциллятора.

ГАРМОНИЧЕСКИЙ КВАНТОВЫЙ ОСЦИЛЛЯТОР.

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

В теории дифференциальных уравнений доказывается, что это уравнение имеет конечные, однозначные и непрерывные решения при значениях параметра E, равных

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

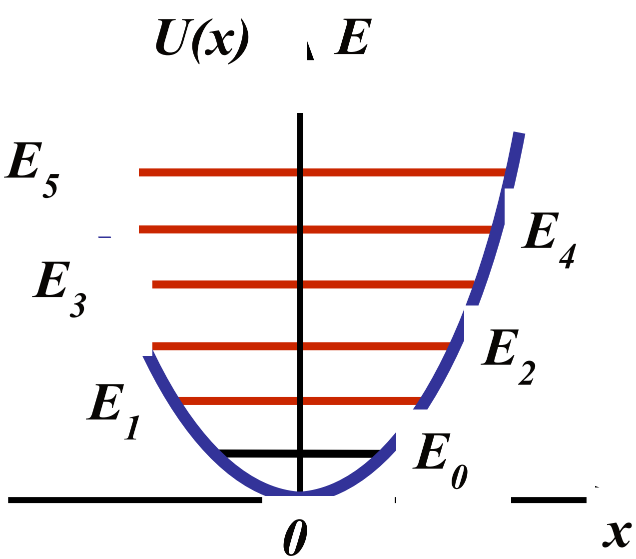


Изобразим условную схему энергетических уровней квантового осциллятора, вписанных для наглядности в кривую потенциальной энергии.

ГАРМОНИЧЕСКИЙ КВАНТОВЫЙ ОСЦИЛЛЯТОР.

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-\frac{m\omega^2x^2}{2}\right)\psi=0. \qquad \boxed{E_n=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)}, \qquad (n=0,\,1,\,2,\,\ldots).$$

<u>Выводы:</u> 1. Энергетический спектр квантового гармонического осциллятора является *дискретным.*

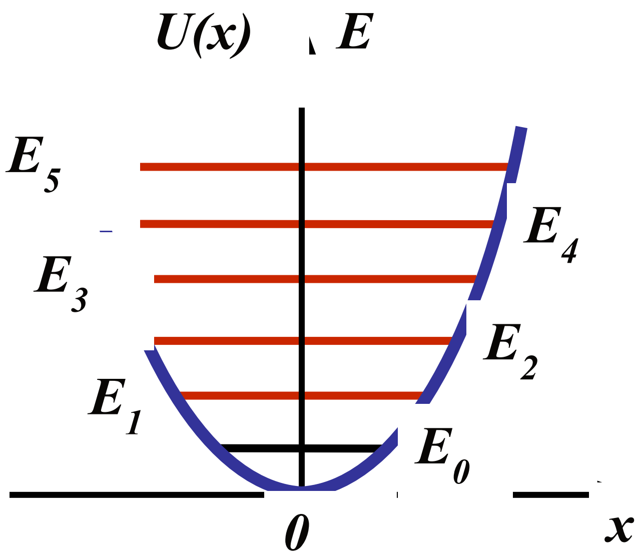


2. Минимальное значение главного квантового числа ***n*** не 1, а 0. Для основного состояния ***n = 0***, энергия основного состояния - .

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

Это наименьшее возможное значение энергии, которое называют *нулевой энергией*. Любое отличное от нуля значение ***n*** - это *номер возбужденного уровня*.

ГАРМОНИЧЕСКИЙ КВАНТОВЫЙ ОСЦИЛЛЯТОР.



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

3. Энергетические уровни следуют друг за другом через равные интервалы (*эквидистантные* уровни), каждый такой интервал – это минимальный квант энергии, равный $\hbar\omega$. Этот квант получил название ***фонон***.

Из расчетов для квантового гармонического осциллятора возможны лишь переходы между соседними уровнями.

При таких переходах квантовое число n изменяется на единицу:

$$\Delta n = \pm 1$$

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

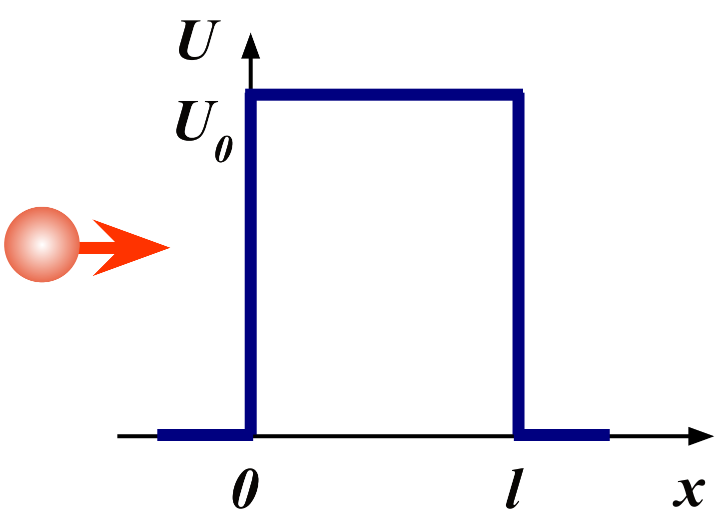
Таким образом, энергия гармонического осциллятора может изменяться только порциями .

ПРОХОЖДЕНИЕ ЧАСТИЦЫ ЧЕРЕЗ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ БАРЬЕР

Введем некоторые определения.

Область пространства, в которой на частицу действует *тормозящая сила* и потенциальная энергия увеличивается, называется *потенциальным барьером*.

Разность потенциальных энергий частицы на границах потенциального барьера называется ***высотой потенциального барьера***.

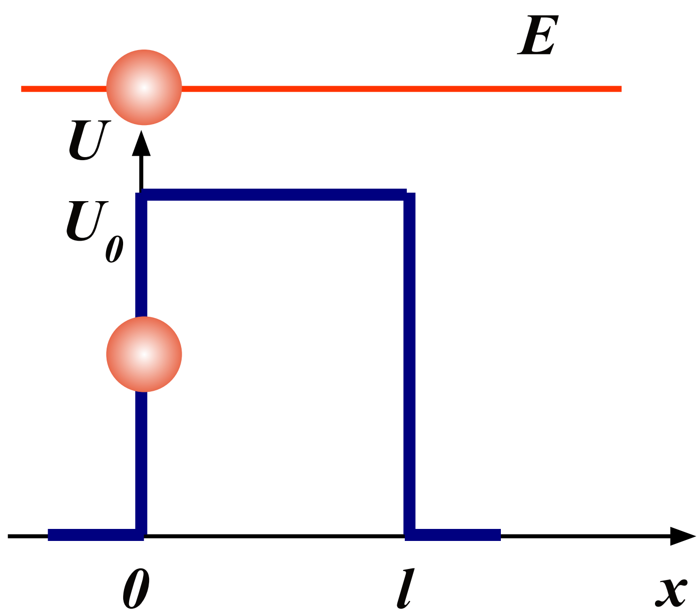


Пусть частица, движущаяся слева направо по оси $\boldsymbol{x}$, встречает на своем пути прямоугольный потенциальный барьер высотой U_0 и шириной $\boldsymbol{l}$.

ПРОХОЖДЕНИЕ ЧАСТИЦЫ ЧЕРЕЗ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ БАРЬЕР

По классическим представлениям поведение частицы имеет следующий характер.

Если энергия частицы больше высоты потенциального барьера $E>U_0$, частица беспрепятственно проходит над барьером.



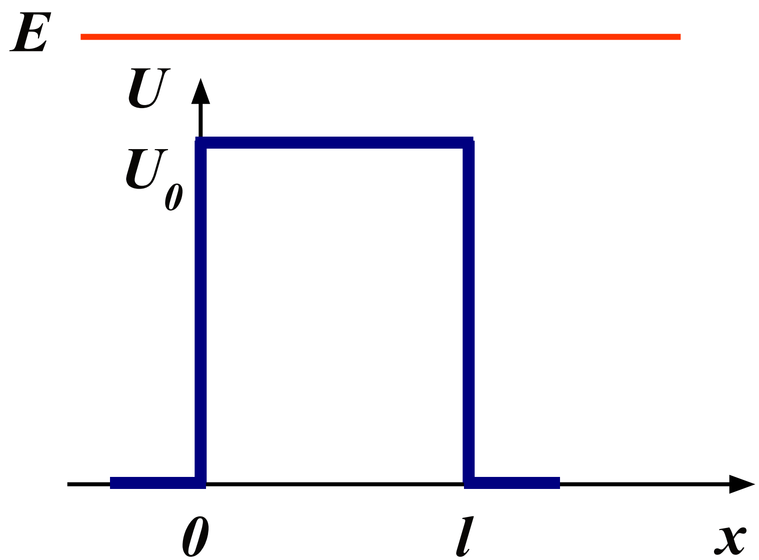
На участке $0 \leq x \leq l$ лишь уменьшается скорость частицы, но затем при $x > l$ снова принимает первоначальное значение.

Если же $E<U_0$, то частица отражается от барьера и летит в обратную сторону; сквозь барьер частица проникнуть не может.

ПРОХОЖДЕНИЕ ЧАСТИЦЫ ЧЕРЕЗ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ БАРЬЕР

Иначе выглядит поведение частицы в квантовой механике.

Даже при $E>U_0$ имеется ненулевая вероятность того, что частица отразится от барьера и полетит в обратную сторону.



И, наоборот, при $E<U_0$ частица может проникнуть через барьер и оказаться в области $x > l$.

Покажем это, используя уравнение Шредингера. Пусть $E<U_0$.

Запишем стационарное уравнение Шредингера:

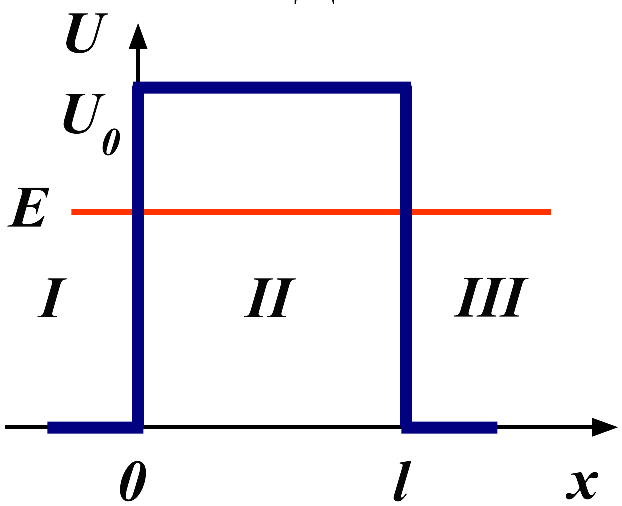
$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}E\psi=0$$

для областей ***I*** и ***III***;

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}-\frac{2m}{\hbar^2}\left(U_0-E\right)\psi=0$$

- для области ***II***.

ПРОХОЖДЕНИЕ ЧАСТИЦЫ ЧЕРЕЗ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ БАРЬЕР



$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}E\psi=0$$ - для областей *I* и *III*

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}-\frac{2m}{\hbar^2}(U_0-E)\psi=0$$ - для области *II*

Введем обозначения:

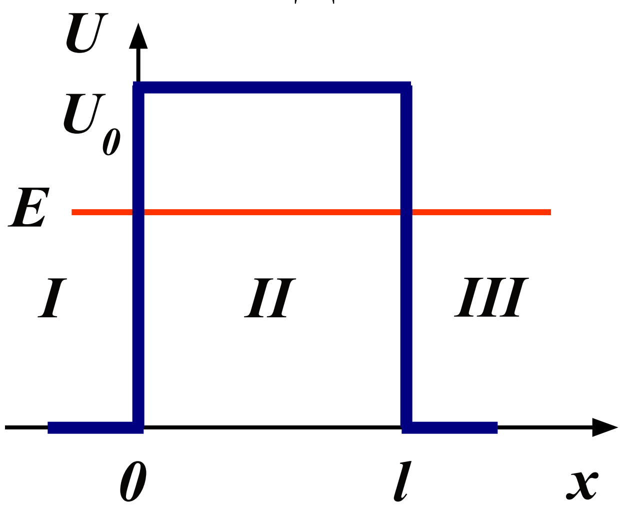
$$k^2=\frac{2m}{\hbar^2}E\,,\qquad \beta^2=\frac{2m}{\hbar^2}(U_0-E)$$

С учетом этих обозначений перепишем уравнения:

$$\frac{\partial^2\psi_{1,3}}{\partial x^2}+k^2\psi_{1,3}=0\qquad\qquad \frac{\partial^2\psi_2}{\partial x^2}-\beta^2\psi_2=0$$

Нижними индексами у пси-функций обозначили области, которым соответствует уравнение Шредингера.

ПРОХОЖДЕНИЕ ЧАСТИЦЫ ЧЕРЕЗ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ БАРЬЕР



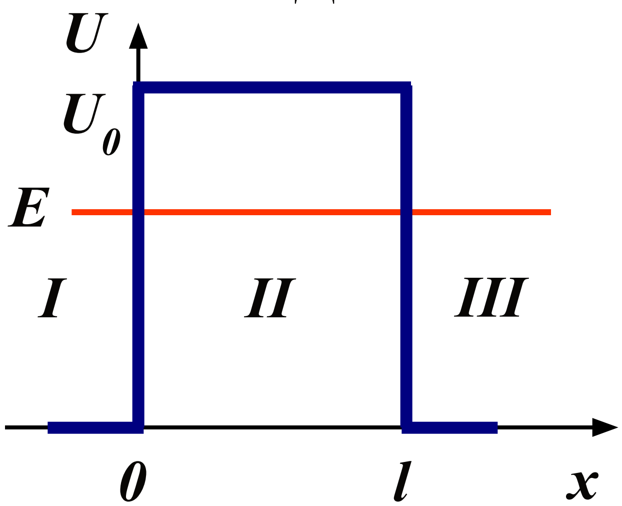
$$\frac{\partial^2 \psi_{1,3}}{\partial x^2} + k^2 \psi_{1,3} = 0$$

$$\frac{\partial^2 \psi_2}{\partial x^2} - \beta^2 \psi_2 = 0$$

Данные уравнения – это *линейные дифференциальные однородные уравнения второго порядка с постоянными коэффициентами*

Такие уравнения обычно решают методом подстановки.

ПРОХОЖДЕНИЕ ЧАСТИЦЫ ЧЕРЕЗ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ БАРЬЕР



$$\frac{\partial^2\psi_{1,3}}{\partial x^2}+k^2\psi_{1,3}=0$$

$$\frac{\partial^2\psi_2}{\partial x^2}-\beta^2\psi_2=0$$

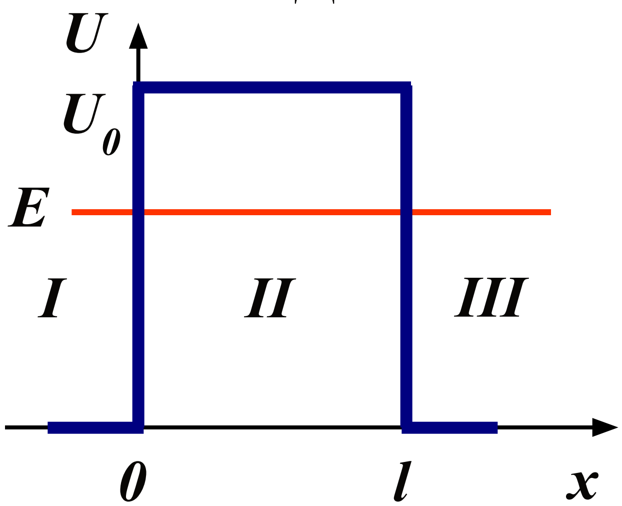
Решение уравнений будем искать в виде $\psi=exp(\lambda x)$, где λ - постоянная величина.

Подставим это решение в первое уравнение:

$$\frac{\partial\psi}{\partial x}=\lambda\, exp(\lambda x),\qquad \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}=\lambda^2 exp(\lambda x).$$ В итоге получим:

$$\lambda^2\exp(\lambda x)+k^2\exp(\lambda x)\ \Rightarrow\ \lambda^2+k^2=0$$

ПРОХОЖДЕНИЕ ЧАСТИЦЫ ЧЕРЕЗ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ БАРЬЕР



$$\frac{\partial^2\psi_{1,3}}{\partial x^2}+k^2\psi_{1,3}=0$$

$$\frac{\partial^2\psi_2}{\partial x^2}-\beta^2\psi_2=0$$

$$\lambda^2+k^2=0$$

Отсюда $\lambda=\pm ik$ (два мнимых корня).

Для второго уравнения получим $\lambda^2-\beta^2=0$, $\lambda=\pm\beta$ (два действительных корня).

Общие решения уравнений для каждой из областей:

$\psi_1=A_1\exp(ikx)+B_1\exp(-ikx)$ - для области *I*.

$\psi_2=A_2\exp(\beta x)+B_2\exp(-\beta x)$ - для области *II*.

$\psi_3=A_3\exp(ikx)+B_3\exp(-ikx)$ - для области *III*.

ПРОХОЖДЕНИЕ ЧАСТИЦЫ ЧЕРЕЗ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ БАРЬЕР

$$\psi_1 = A_1 \exp(ikx) + B_1 \exp(-ikx)$$

$$\psi_2 = A_2 \exp(\beta x) + B_2 \exp(-\beta x)$$

$$\psi_3 = A_3 \exp(ikx) + B_3 \exp(-ikx)$$

Для того, чтобы знать вид волновых функций в каждой из областей, нужно найти значения констант A_1, A_2, A_3, B_1, B_2, B_3.

Константы определяются путем «сшивания» уравнений на границах областей с помощью граничных условий.

Однако предварительно проведем общий анализ уравнений.

В уравнении для области ***II*** с ростом x первое слагаемое неограниченно нарастает.

Поэтому для того, чтобы пси-функция удовлетворяла условию *ограниченности*, постоянная A_2 должна быть равна нулю.

ПРОХОЖДЕНИЕ ЧАСТИЦЫ ЧЕРЕЗ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ БАРЬЕР

$$\psi_1 = A_1 \exp(ikx) + B_1 \exp(-ikx)$$

$$\psi_2 = A_2 \exp(\beta x) + B_2 \exp(-\beta x)$$

$$\psi_3 = A_3 \exp(ikx) + B_3 \exp(-ikx)$$

В результате уравнение для области ***II*** будет иметь вид:

$$\psi_2 = B_2 \exp(-\beta x)$$

В областях ***I*** и ***III*** общие решения представляют собой суперпозицию волн, распространяющихся в положительном (решение вида $\boldsymbol{exp(ikx)}$) и отрицательном (решение вида $\boldsymbol{exp(-ikx)}$) направлениях оси $\boldsymbol{x}$.

В области ***III*** - за барьером – есть только проходящая волна, поэтому константу $\boldsymbol{B_3}$ следует положить равной нулю.

Вспомним, что волны, которые ассоциируются со свободно движущимися частицами, получили название *волн де Бройля.*

Следует отметить, что в области ***II*** функция уже не соответствует плоской волне, поскольку показатель степени не мнимый, а действительный.

ПРОХОЖДЕНИЕ ЧАСТИЦЫ ЧЕРЕЗ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ БАРЬЕР

В итоге решения уравнений для трех выделенных областей можно записать в виде:

$$\psi_1 = A_1 \exp(ikx) + B_1 \exp(-ikx)$$
$$\psi_2 = B_2 \exp(-\beta x)$$
$$\psi_3 = A_3 \exp(ikx)$$

Для определения оставшихся неизвестных коэффициентов используются условия *непрерывности* волновой функции на границах барьера – в точках $x = 0$ и $x = l$:

$$\psi_1(0) = \psi_2(0), \qquad \psi_2(l) = \psi_3(l)$$

Для того чтобы волновая функция была *гладкой*, т.е. не имела изломов, в точках $x = 0$ и $x = l$ должны быть равны нулю и ее первые производные:

$$\frac{\partial\psi_1(0)}{\partial x} = \frac{\partial\psi_2(0)}{\partial x}, \qquad \frac{\partial\psi_2(l)}{\partial x} = \frac{\partial\psi_3(l)}{\partial x}$$

ПРОХОЖДЕНИЕ ЧАСТИЦЫ ЧЕРЕЗ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ БАРЬЕР

$$\psi_1 = A_1 \exp(ikx) + B_1 \exp(-ikx)$$

$$\psi_2 = B_2 \exp(-\beta x)$$

$$\psi_3 = A_3 \exp(ikx)$$

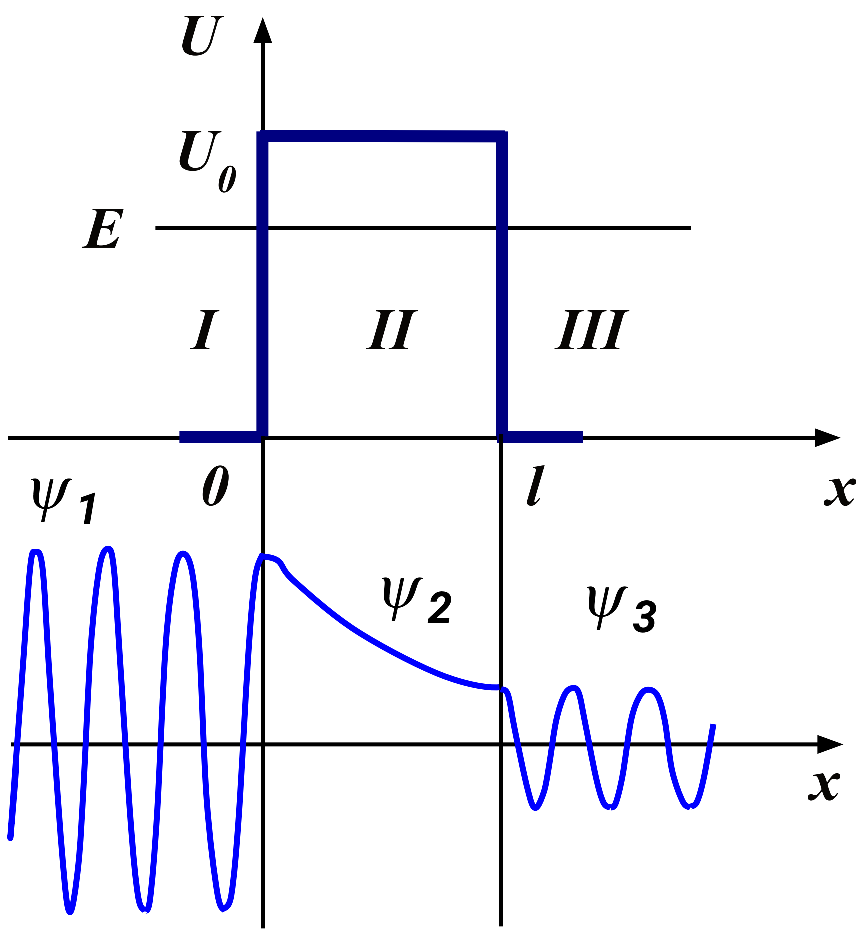
Используя граничные условия, нетрудно получить систему уравнений, из которой и определяются неизвестные константы.

Естественно, эта задача решена. Ограничимся лишь более подробным рассмотрением интересующей нас ситуации – прохождение частицы через барьер.

При условии $E<U_0$ (полная энергия частицы меньше высоты потенциального барьера), законы классической физики однозначно не разрешают частице проникнуть сквозь барьер.

Проведенный анализ движения частицы с позиций квантовой механики уже позволяет сделать вывод о том, что частица имеет *отличную от нуля вероятность* прохождения через потенциальный барьер конечной ширины.

ПРОХОЖДЕНИЕ ЧАСТИЦЫ ЧЕРЕЗ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ БАРЬЕР



$$\psi_1 = A_1 \exp(ikx) + B_1 \exp(-ikx)$$
$$\psi_2 = B_2 \exp(-\beta x)$$
$$\psi_3 = A_3 \exp(ikx)$$

Уравнения для функций ψ_1, ψ_2 и ψ_3 можно качественно проиллюстрировать рисунком.

Из уравнений следует, что волновая функция не равна нулю и внутри барьера, а в области ***III***, если барьер не очень широк, волновая функция будет опять иметь вид волн де Бройля с той же частотой, что и в области ***I***, но с меньшей амплитудой.

ПРОХОЖДЕНИЕ ЧАСТИЦЫ ЧЕРЕЗ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ БАРЬЕР

Таким образом, квантовая механика приводит к принципиально новому специфическому квантовому явлению.

При преодолении потенциального барьера частица как бы пробивает «туннель» в этом барьере, в связи с чем это явление получило название *туннельного эффекта*.

Введем некоторые характеристики, позволяющие описать туннельный эффект.

Вероятность прохождения частицы через барьер определяется отношением квадратов модулей амплитуд прошедшей и падающей волн:

$$D = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2}$$

и называется *коэффициентом прохождения* (или коэффициентом прозрачности).

ПРОХОЖДЕНИЕ ЧАСТИЦЫ ЧЕРЕЗ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ БАРЬЕР

По аналогии можно ввести и *коэффициент отражения* частицы от барьера:

$$R = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2}$$

Очевидно, что $D + R = 1$

Связь коэффициента D с параметрами барьера выражается приближенным соотношением вида:

$$D \approx exp(-2\beta l) = exp\left(-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - E)}\,l\right)$$

С классической точки зрения туннельный эффект абсурден, так как частица в «туннеле» должна была бы обладать отрицательной кинетической энергией, поскольку в туннеле $E<U_0$.

Туннельный эффект явление чисто квантовое, не имеющее аналога в классической физике.

В квантовой механике деление полной энергии на потенциальную и кинетическую не имеет смысла