

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

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

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:

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

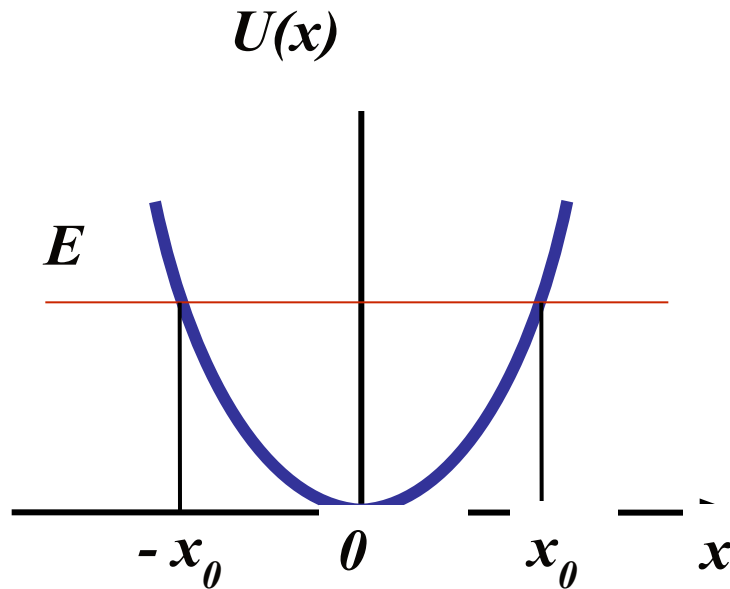
Собственная частота классического гармонического осциллятора равна $\omega = \sqrt{k/m}$. Выразив отсюда k , получим

$$U = \frac{m\omega^2 x^2}{2} \quad \text{Это уравнение параболы.}$$

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:

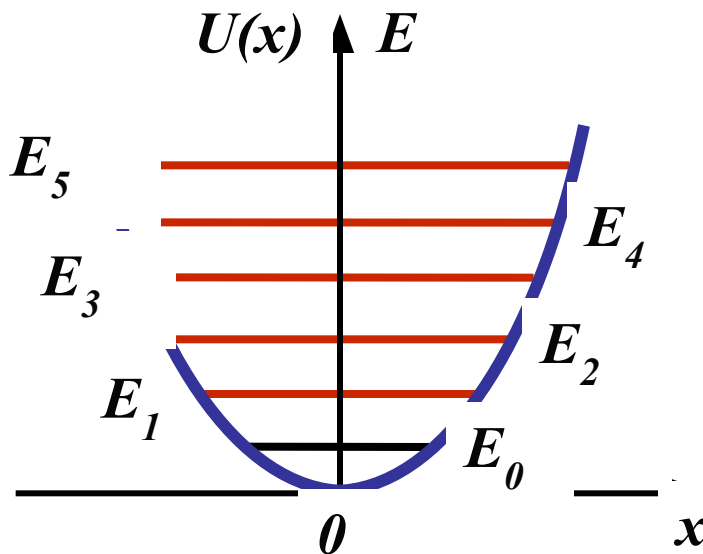
$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right) \psi = 0. \quad E - \text{полная энергия осциллятора.}$$

ГАРМОНИЧЕСКИЙ КВАНТОВЫЙ ОСЦИЛЛЯТОР.

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

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

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

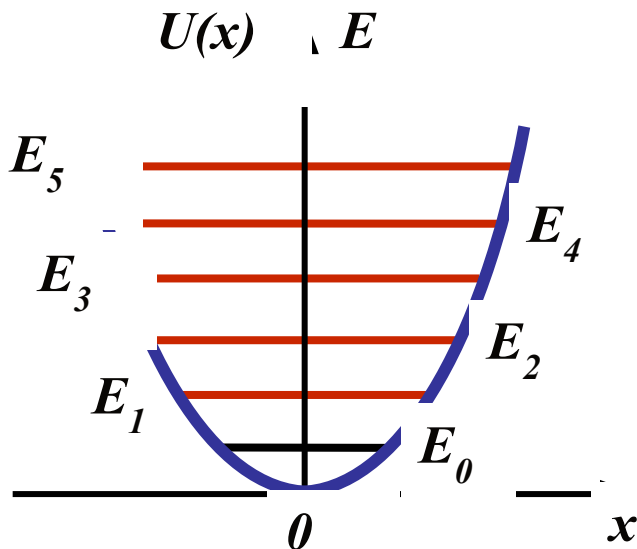


Изобразим условную схему энергетических уровней квантового осциллятора, вписанных для наглядности в кривую потенциальной энергии.

ГАРМОНИЧЕСКИЙ КВАНТОВЫЙ ОСЦИЛЛЯТОР.

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

Выводы: 1. Энергетический спектр квантового гармонического осциллятора является *дискретным*.

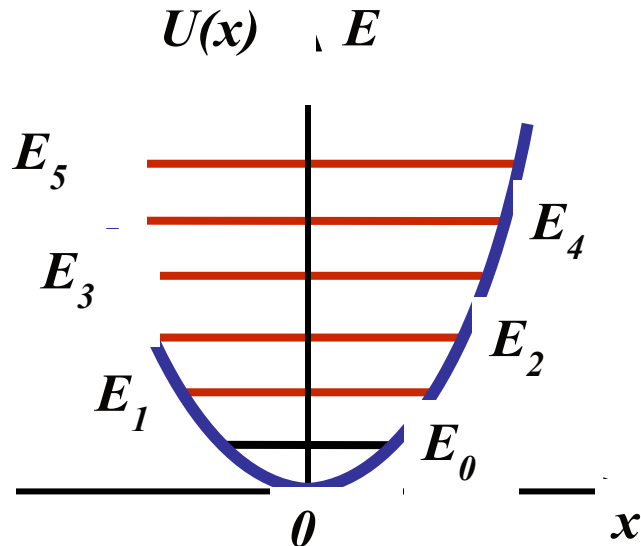


2. Минимальное значение главного квантового числа n не 1, а 0. Для основного состояния $n = 0$, энергия основного состояния - .

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

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

ГАРМОНИЧЕСКИЙ КВАНТОВЫЙ ОСЦИЛЛЯТОР.



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

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*.

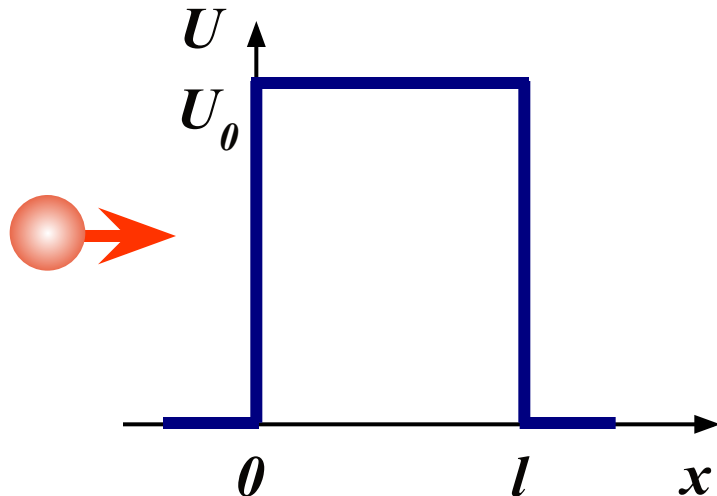
Таким образом, энергия гармонического осциллятора может изменяться только порциями.

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*.

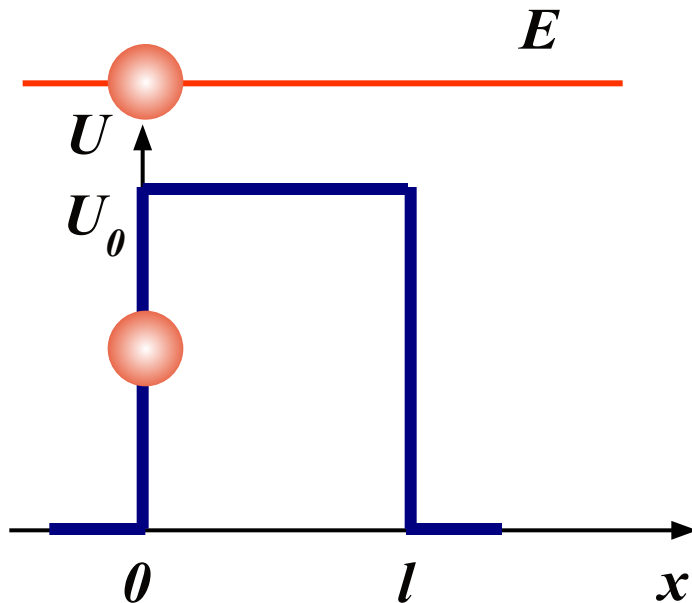


Пусть частица, движущаяся слева направо по оси x , встречает на своем пути прямоугольный потенциальный барьер высотой U_0 и шириной l .

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.



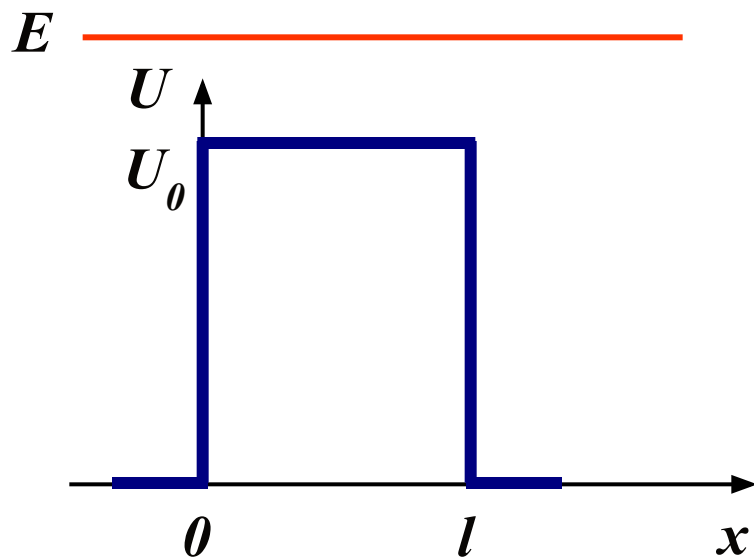
На участке $0 \leq x \leq l$ лишь уменьшается скорость частицы, но затем при $x > l$ снова принимает первоначальное значение.

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 $x > l$.

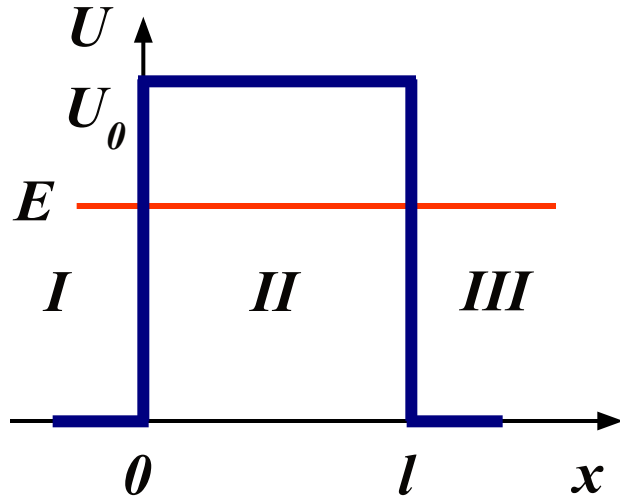
Покажем это, используя уравнение Шредингера. Пусть $E < U_0$.

Запишем стационарное уравнение Шредингера:

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

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

ПРОХОЖДЕНИЕ ЧАСТИЦЫ ЧЕРЕЗ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ БАРЬЕР



Введем обозначения:

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

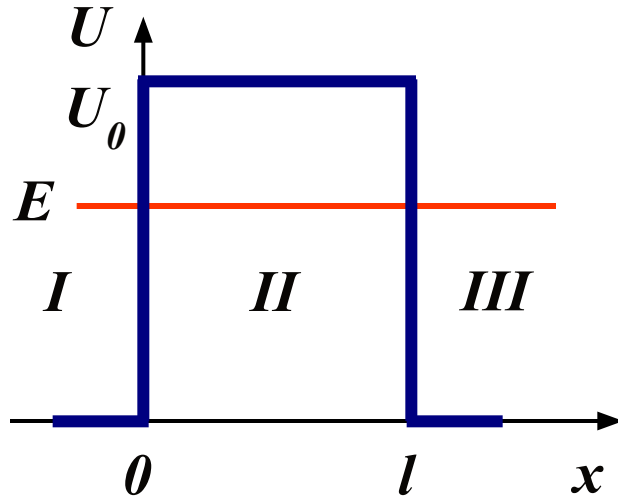
С учетом этих обозначений перепишем уравнения:

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

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

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

ПРОХОЖДЕНИЕ ЧАСТИЦЫ ЧЕРЕЗ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ БАРЬЕР



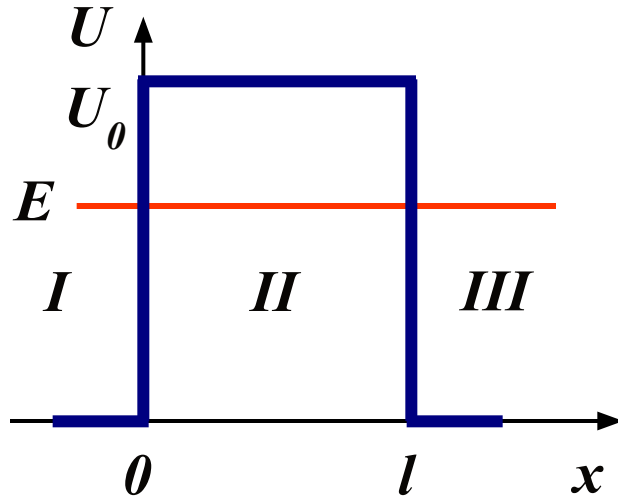
$$\frac{\partial^2 \psi_{1,3}}{\partial x^2} + k^2 \psi_{1,3} = 0$$

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

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

Такие уравнения обычно решают методом подстановки.

ПРОХОЖДЕНИЕ ЧАСТИЦЫ ЧЕРЕЗ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ БАРЬЕР



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

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

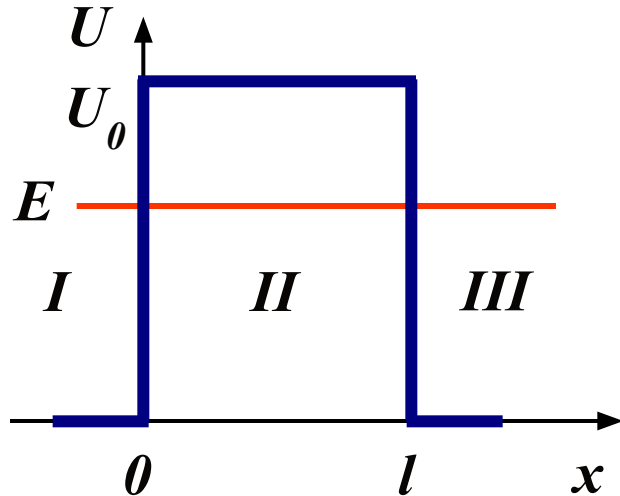
Решение уравнений будем искать в виде $\psi = \exp(\lambda x)$, где λ - постоянная величина.

Подставим это решение в первое уравнение:

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

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

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:

$$\psi_1 = A_1 \exp(ikx) + B_1 \exp(-ikx) \quad - \text{ для области } I.$$

$$\psi_2 = A_2 \exp(\beta x) + B_2 \exp(-\beta x) \quad - \text{ для области } II.$$

$$\psi_3 = A_3 \exp(ikx) + B_3 \exp(-ikx) \quad - \text{ для области } III.$$

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

$\psi_1 = A_1 \exp(ikx) + B_1 \exp(-ikx)$ В результате уравнение для области *II* будет иметь вид:

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

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

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

В области *III* - за барьером - есть только проходящая волна, поэтому константу 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 $x = l$:

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

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:

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

ПРОХОЖДЕНИЕ ЧАСТИЦЫ ЧЕРЕЗ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ БАРЬЕР

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

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

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

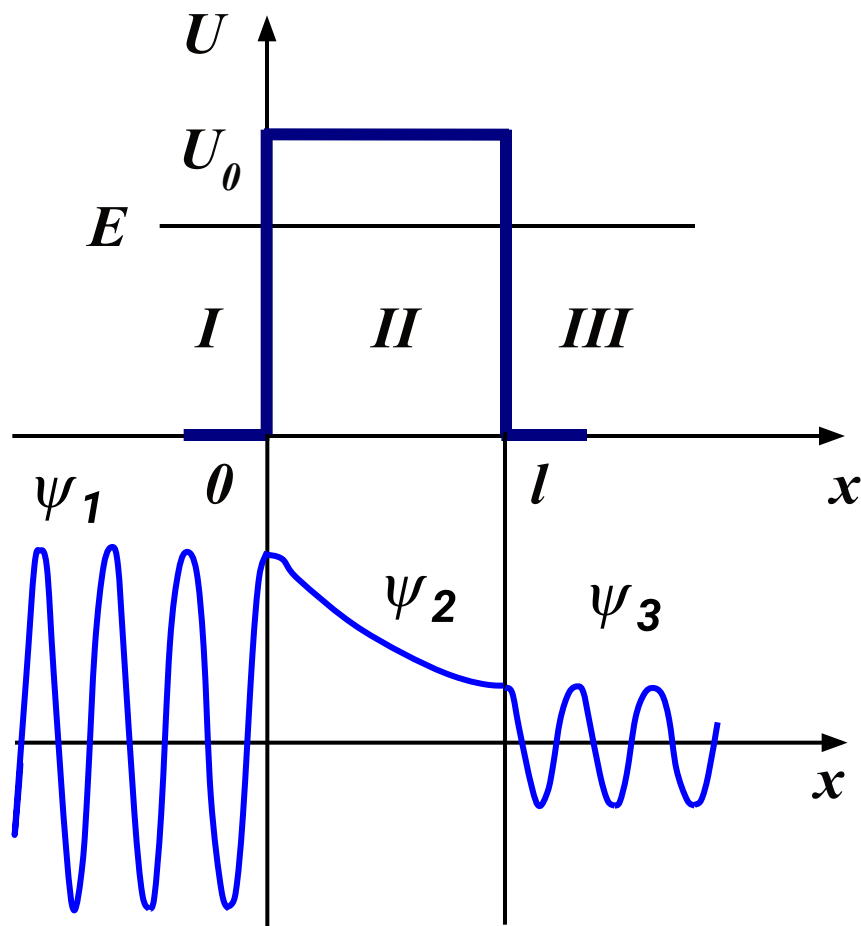
Используя граничные условия, нетрудно получить систему уравнений, из которой и определяются неизвестные константы.

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:

$$R = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2} \quad \text{Очевидно, что} \quad D + R = 1$$

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