Основные задачи квантовой механики

1.Свободная частица (U=0)

Уравнение Шрёдингера принимает вид:

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

$$\nabla^2\psi + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0$$

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

$$\nabla^2\psi + k^2\psi = 0$$

- Решением данного уравнения является функция:

$$\psi = ce^{i\bar{k}\bar{r}} = ce^{ipr/\hbar}$$

(координатная часть плоской волны).

Домножим на временную часть:

$$\psi(x,y,z,t) = ce^{i\left(\frac{\bar{p}\bar{r}}{\hbar} - \frac{Et}{\hbar}\right)}$$

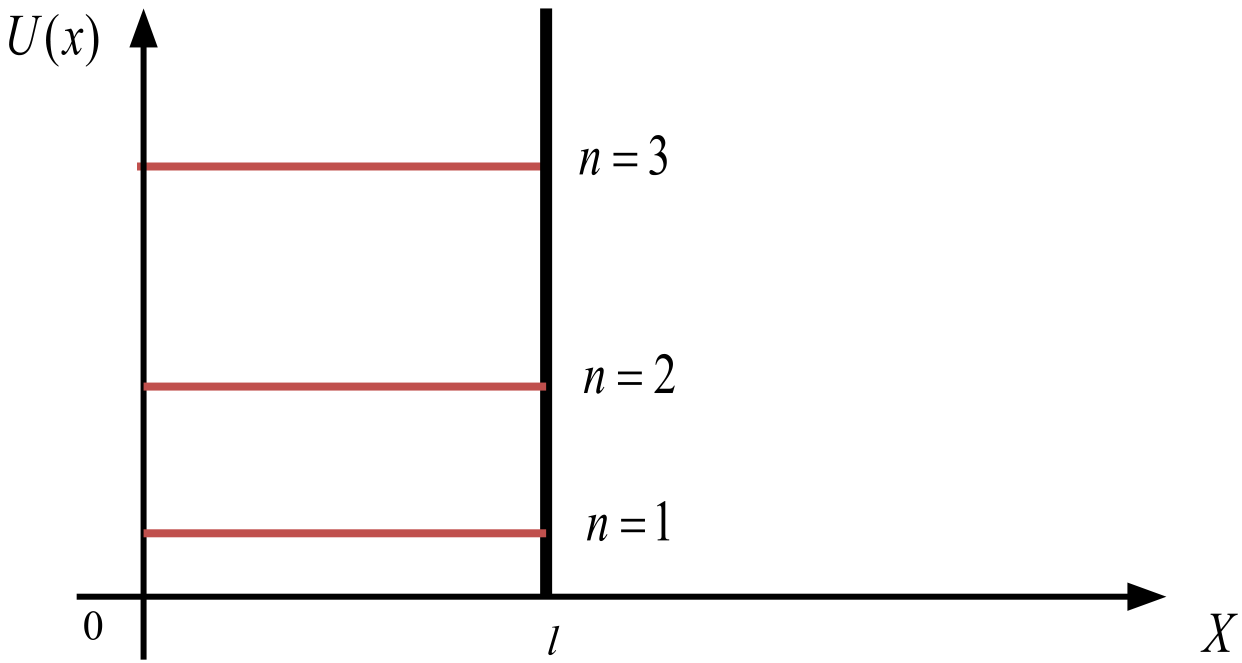
- уравнение плоской волны (волны де Бройля).

Этот факт является исходным для квантовой механики. Свободной частице, обладающей энергией E и импульсом p, сопоставлялась волна де Бройля.

Коэффициент C находится из условия нормировки

2.Частица в одномерной потенциальной яме

Иногда, это трактуют как бесконечно высокий одномерный ящик.



$$U(x) = 0 \qquad 0 < x < \ell \qquad U(0) = U(\ell) = \infty$$

$$U(x) = \infty \qquad (x \leq 0; x \geq \ell;)$$

- Вероятность обнаружить частицу за пределами ямы равна нулю.

$$\psi\left(x\right)=0 \qquad \left(x\leq 0; x\geq l;\right)$$

- Граничные условия:

$$\psi\left(0\right)=0; \psi\left(l\right)=0$$

Запишем уравнение Шрёдингера:

$$\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(x) + E\psi(x) = 0$$

В стандартных преобразованиях:

$$\nabla^2\psi(x) + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) = 0$$

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

$$\nabla^2\psi(x) + k^2\psi(x) = 0$$

- Решение ищем в виде

$$\psi\left(x\right) = a\sin(kx + \delta);$$

- Используем граничные условия

$$\psi\left(0\right) = a\sin(\delta) = 0$$

$$\psi(l) = a\sin kl = 0$$

$$(\delta = 0);$$

- Волновое число квантуется

$$k_n = \frac{\pi n}{l}$$

- $$k\square = \pi n, \qquad n = \pm 1; \pm 2; \pm 3 \ldots\ldots$$

Таким образом $\psi(x) = a\sin(\frac{\pi n}{l}x);$

Коэффицент а находится из условия нормировки волновой функции:

$$\int_0^l a^2\sin^2(\frac{\pi n}{l}x)dx = a^2\int_0^l \frac{1-\cos(\frac{2\pi n}{l}x)}{2}dx =$$

$$\frac{a^2}{2}x\Big|_0^l - \frac{a^2 l}{4\pi n}\sin\frac{2\pi n}{l}x\Big|_0^l = 1;$$

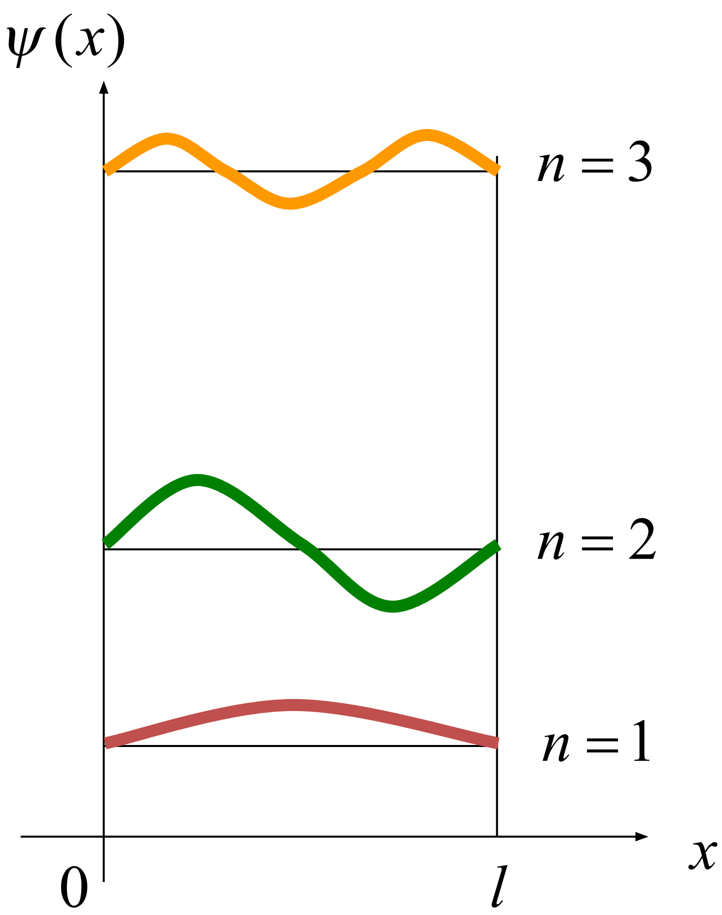
$$\frac{a^2 l}{2} = 1; \qquad a = \sqrt{\frac{2}{l}}.$$

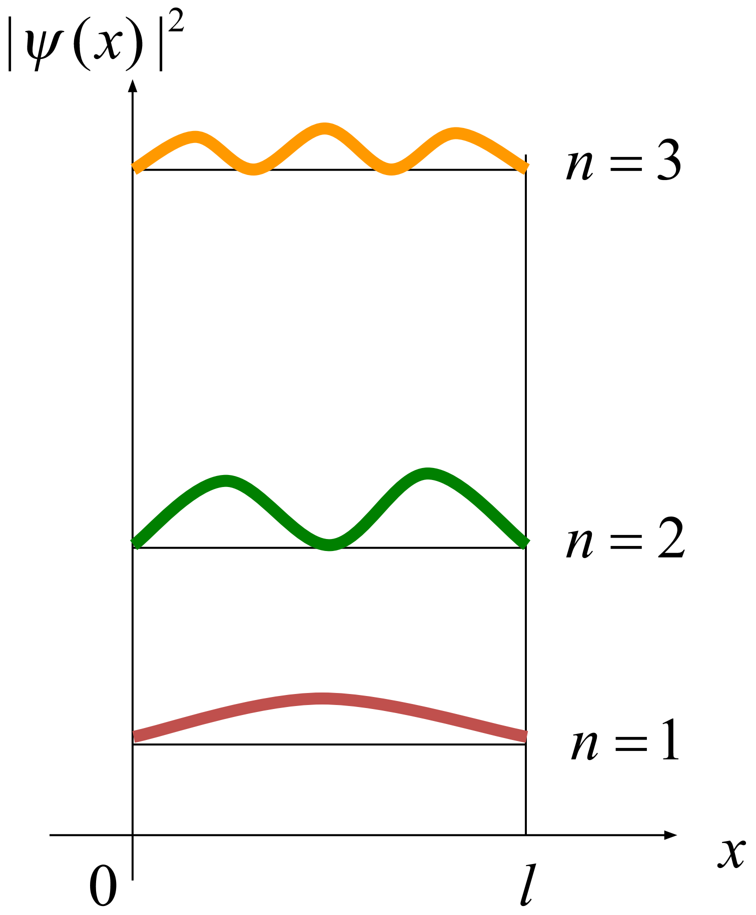
- Получаем собственные волновые функции

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\left(\frac{\pi n}{l} x\right);$$

- И собственные значения энергии частицы в потенциальной яме, исходя из того, что

$$k_n{}^2 = \frac{2mE_n}{\hbar^2}; \quad E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2m l^2}; \; n = 1;2;3;.....$$


$\psi(x)$
$n=3$
$n=2$
$n=1$
x
0
l


$|\psi(x)|^2$
$n=3$
$n=2$
$n=1$
x
0
l

3. Гармонический осциллятор

Гармонические колебания совершаются под действием квазиупругой силы (F=-kx);

Потенциальная энергия определится:

$$U(x)=\frac{kx^2}{2}=\frac{m\omega^2x^2}{2}\ ,$$

где $$\omega^2=\frac{k}{m}.$$

ω - собственная частота гармонического колебания.

Гармонический осциллятор

- Уравнение Шредингера имеет вид

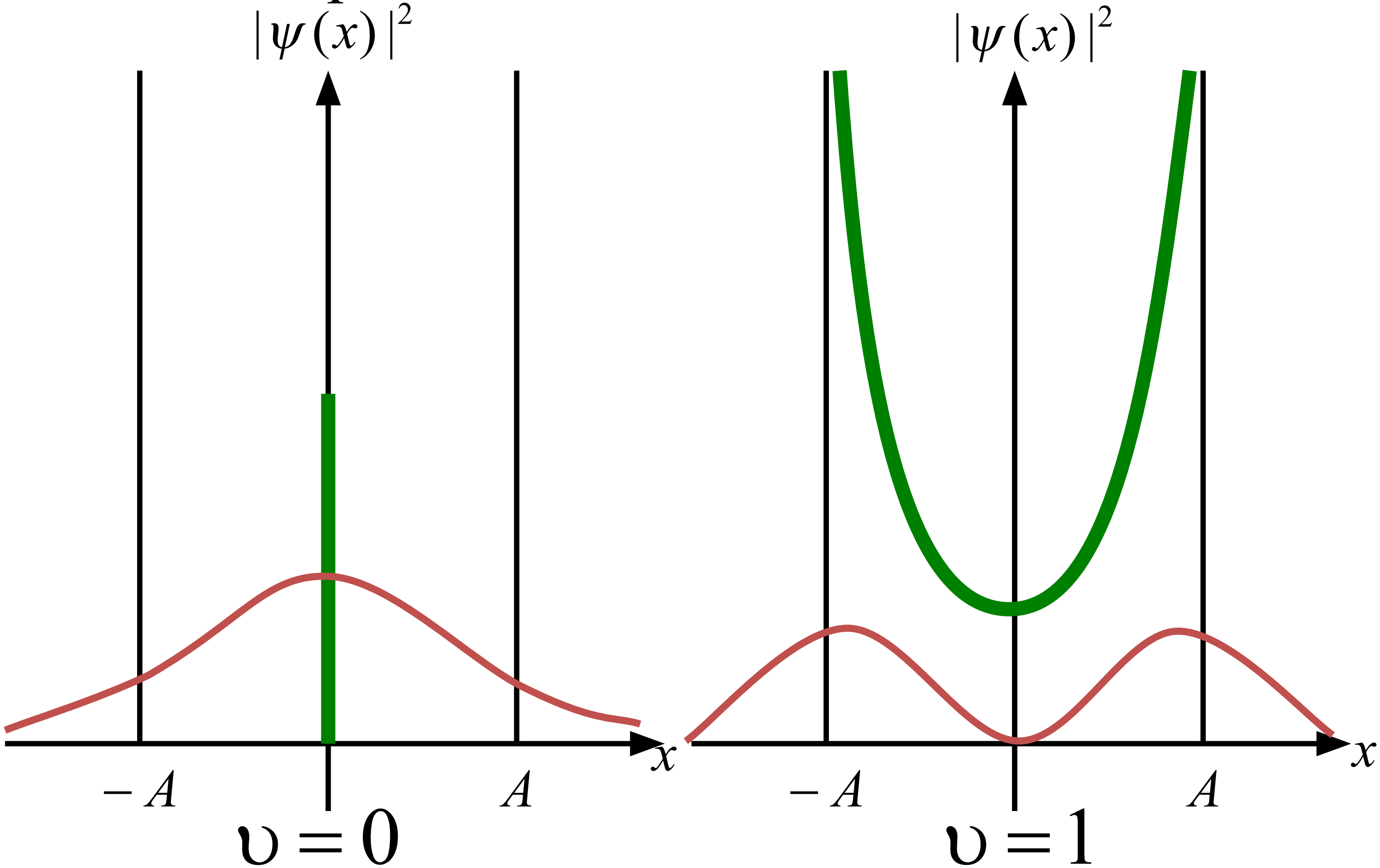
$$\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(x) + \left(E - \frac{m\omega^2 x}{2}\right)\psi(x) = 0$$

- Данное дифференциальное уравнение имеет решение только для определенных значений энергии

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

υ - колебательное квантовое число, на которое накладывается правило отбора $\Delta\upsilon = \pm 1.$

Сравним квантовый осциллятор с классическим осциллятором:



классический; квантовый

Туннельный эффект

Поведение квантовой частицы налетающей на потенциальный барьер, принципиально отличается от поведения классической частицы. Классическая частица налетая на низкий потенциальный барьер, проходит не ощущая его.

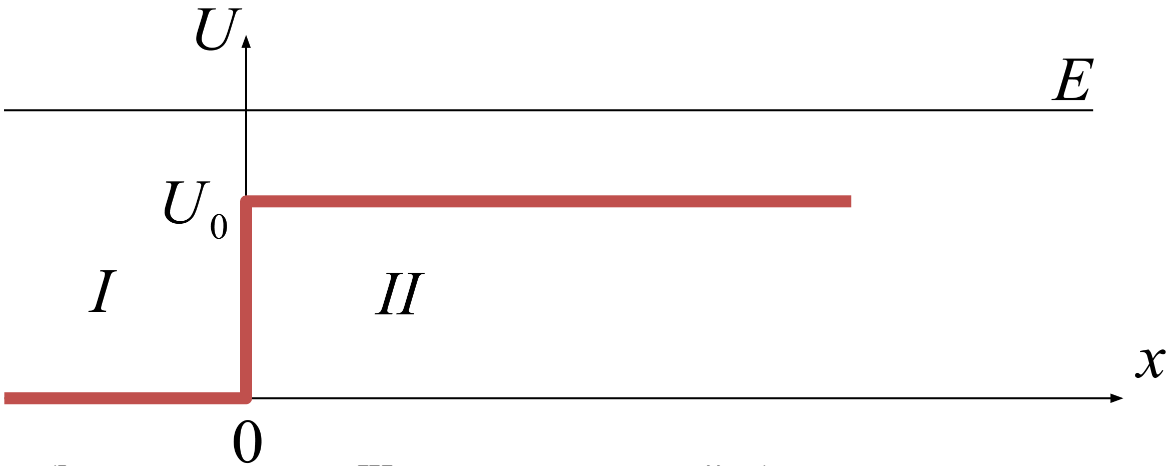
Квантовая частица может отразиться от этого низкого потенциального барьера.

Потенциальный барьер называется низким, если энергия частицы больше чем высота потенциального барьера.

Классическая частица, налетая на высокий потенциальный барьер, отражается от него. Квантовая частица может просочиться через этот потенциальный барьер – это называется туннельным эффектом.

Высоким потенциальным барьером называется барьер, энергия которого выше энергии налетающей на него частицы.

Низкий потенциальный барьер:



Запишем уравнения Шрёдингера для каждой области:

I: $U = 0$

$$\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_1 + E\psi_1 = 0$$

$$\nabla^2\psi_1 + E\frac{2m}{\hbar^2}\psi_1 = 0$$

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

$$\nabla^2\psi_1 + k^2\psi_1 = 0$$

II: $U = U_0$

$$\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_2 + (E - U_0)\psi_2 = 0$$

$$\nabla^2\psi_2 + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0)\psi_2 = 0$$

$$\frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0) = \chi^2$$

$$\nabla^2\psi_2 + \chi^2\psi_2 = 0$$

Решение данных уравнений ищется в виде:

I: $\psi_1 = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}$ II: $\psi_2 = A_2 e^{i\chi x} + B_2 e^{-i\chi x}$

Первые слагаемые волновых функций соответствуют плоской волне, падающей на потенциальный барьер.

Вторые слагаемые волновых функций соответствуют волнам, отраженным от потенциального барьера.

Во второй области нет отражения, следовательно $B_2 = 0$

Рассматриваемый процесс будет описываться волновыми функциями:

$$\psi_1 = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}$$

$$\psi_2 = A_2 e^{i\chi x}$$

Коэффициент A_1, B_1 и A_2 определим из условия непрерывности и гладкости волновой функции.

Условие непрерывности: $\psi_1(0) = \psi_2(0)$

Условие гладкости: $\psi_1{}'(0) = \psi_2{}'(0)$

Для оценки коэффициентов отражение и пропускания необходимо найти:

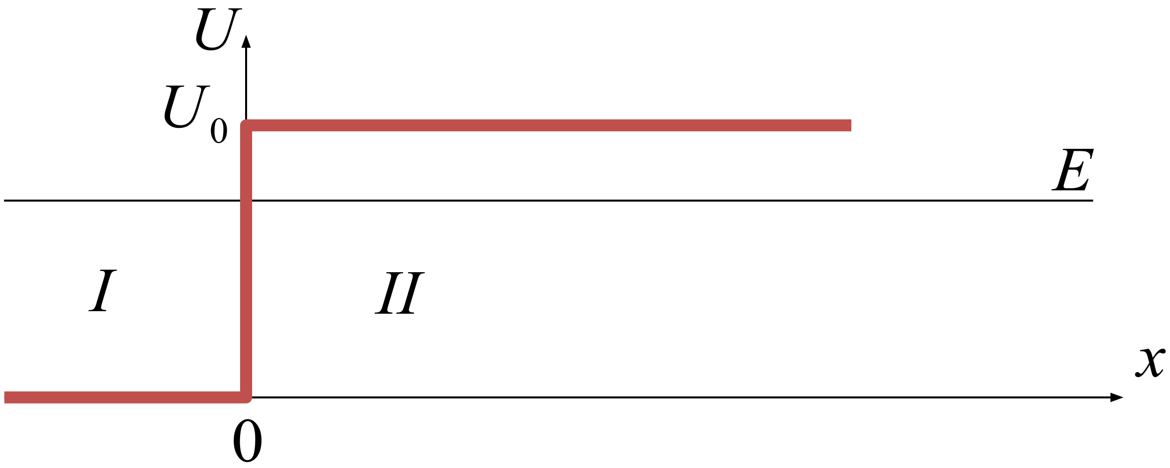
$$R = \left|\frac{B_1}{A_1}\right|^2 \qquad T = \left|\frac{A_2}{A_1}\right|^2$$

$$\begin{cases} A_1 + B_1 = A_2 \\ ikA_1 - ikB_1 = i\chi A_2 \end{cases}$$

$$\frac{B_1}{A_1} = \frac{k-\chi}{k+\chi} \qquad R = \left|\frac{k-\chi}{k+\chi}\right|^2$$

$$\frac{A_2}{A_1} = \frac{2k}{k+\chi} \qquad T = \left|\frac{2k}{k+\chi}\right|^2$$

Высокий потенциальный барьер:



I: $U = 0$

$$\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_1 + E\psi_1 = 0$$

$$\nabla^2\psi_1 + E\frac{2m}{\hbar^2}\psi_1 = 0$$

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

$$\nabla^2\psi_1 + k^2\psi_1 = 0$$

II: $U = U_0$

$$\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_2 + (E - U_0)\psi_2 = 0$$

$$\nabla^2\psi_2 + \frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2}\psi_2 = 0$$

$$\frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E) = \chi^2$$

$$\nabla^2\psi_2 - \chi^2\psi_2 = 0$$

Решения этих уравнений будем искать в виде:

I: $\psi_1 = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}$

II: $\psi_2 = A_2 e^{-\chi x} + B_2 e^{\chi x}$

Т.к. во второй области нет отражения, то $B_2 = 0$

Рассматриваемый процесс будет описываться волновыми функциями:

$$\psi_1 = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} \qquad \psi_2 = A_2 e^{-\chi x}$$

Воспользуемся условиями непрерывности и гладкости:

$$\begin{cases} A_1 + B_1 = A_2 \\ ikA_1 - ikB_1 = -\chi A_2 \end{cases}$$

Решая систему, находим

$$\frac{B_1}{A_1} = \frac{ik + \chi}{ik - \chi}$$

$$\frac{A_2}{A_1} = \frac{2k}{k + i\chi}$$

- Воспользуемся достигнутыми результатами для того, чтобы рассчитать вероятность, с которой частица может быть обнаружена под барьером в точках с координатами от x до $x + dx$, а также эффективную глубину проникновения частицы $x > 0$.

Для упрощения расчетов положим $A_1 = 1$, что принципиально ничего не меняет. Тогда

$$\psi_1 = e^{kx} + \frac{\chi + ik}{ik - \chi} e^{-kx}; \quad \psi_2 = \frac{2k}{k + i\chi} e^{-\chi x}$$

- Вероятность обнаружения частицы под потенциальным барьером в точке с координатой x определяется $|\psi_2|^2$. Вероятность нахождения частицы в интервале dx определяется

$$dP = |\psi_2|^2\,dx = \frac{4k^2}{k^2+\chi^2}e^{-2\chi x}dx.$$

Отношение $\frac{dP}{dx} = g(x)$ называется плотностью вероятности. Эффективной глубиной проникновения частицы называют такую глубину, на которой плотность вероятности уменьшается в e раз.

- Эффективная глубина проникновения частицы зависит от ее массы, энергии и высоты потенциального барьера

$$g(x) = \frac{4k^2}{k^2 + \chi^2} e^{-2\chi x}; \quad g(0) = \frac{4k^2}{k^2 + \chi^2};$$

$$g(x_{эф}) = \frac{4k^2}{k^2 + \chi^2} e^{-2\chi x_{эф}};$$

$$\frac{g(0)}{g(x)} = e; \quad e^{2\chi x_{эф}} = e; \quad 2\chi x_{эф} = 1; \quad x_{эф} = \frac{1}{2\chi} = \frac{\hbar}{2\sqrt{2m(U_0 - E)}}.$$

Барьер прямоугольной формы.

I: $U = 0$

$$\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_1 + E\psi_1 = 0$$

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

$$\nabla^2\psi_1 + k^2\psi_1 = 0$$

II: $U = U_0$

$$\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_2 + (E - U_0)\psi_2 = 0$$

$$\chi^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E)$$

$$\nabla^2\psi_2 - \chi^2\psi_2 = 0$$

III: $U = 0$

$$\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_3 + E\psi_3 = 0$$

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

$$\nabla^2\psi_3 + k^2\psi_3 = 0$$

Решения этих уравнений будем искать в виде:

I: $\psi_1 = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}$

II: $\psi_2 = A_2 e^{-\chi x} + B_2 e^{\chi x}$

III: $\psi_3 = A_3 e^{ikx}$, $B_3 = 0$ - так как в третьей области нет отражения

Для нахождения коэффициента отражения от потенциального барьера и пропускания через потенциальный барьер воспользуемся условиями непрерывности и гладкости

$$\psi_1(0) = \psi_2(0)$$
$$\psi_1'(0) = \psi_2'(0)$$

$$\psi_2(l) = \psi_3(l)$$
$$\psi_2'(l) = \psi_3'(l)$$

$$\left|\frac{B_1}{A_1}\right|^2$$ - отражение

$$\left|\frac{A_3}{A_1}\right|^2$$ - пропускание

Туннельный эффект

$$\begin{cases} A_1 + B_1 = A_2 + B_2 \\ A_2 e^{-\chi l} + B_2 e^{\chi l} = A_3 e^{ikl} \\ ikA_1 - ikB_1 = -\chi A_2 + \chi B_2 \\ -\chi A_2 e^{-\chi l} + \chi B_2 e^{\chi l} = ikA_3 e^{ikl} \end{cases}$$

$$\left|\frac{A_3}{A_1}\right|^2 \sim e^{-2\chi l}$$

$$e^{-2\chi l} = e^{\frac{-2\sqrt{(U_0 - E)2m}}{\hbar} l}$$

- Коэффициент пропускания зависит от массы частицы, ширины и высоты потенциального барьера, а также от энергии, налетающей на барьер частицы.