Лекция 5

ПЛАН ЛЕКЦИИ

Примеры решения квантовых задач:

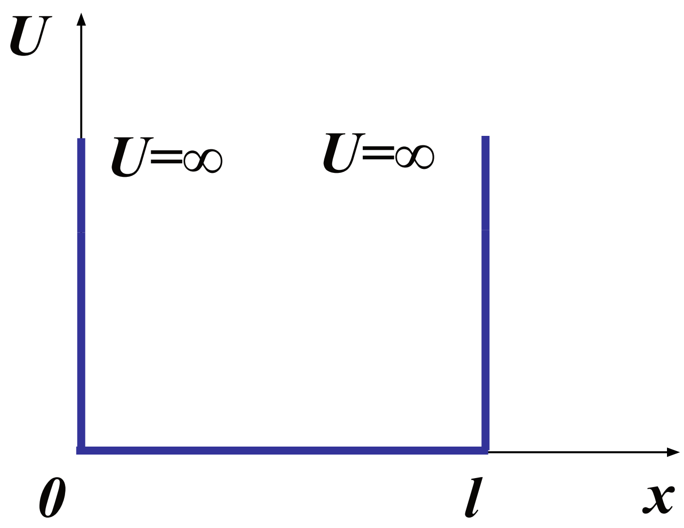
-Частица в одномерной глубокой потенциальной яме.

-Прохождение частицы через потенциальный барьер. Туннельный эффект.

Частица в одномерной бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме.

Задача: найти собственные значения энергии и соответствующие им собственные функции для частицы, находящейся в бесконечно глубокой одномерной потенциальной яме.

Потенциальная яма - область пространства, в которой потенциальная энергия частицы достигает локального минимума.



Одномерный случай: частица движется только вдоль оси x.

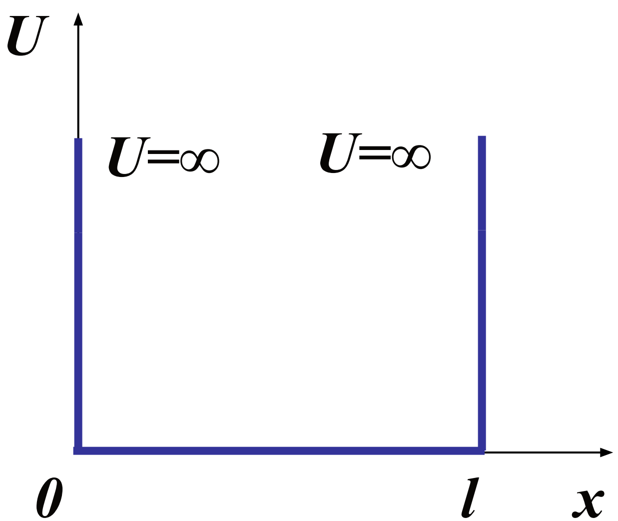
Пусть движение ограничено непроницаемыми для частицы отвесными стенками с координатами $x = 0$ и $x = l$.

Частица в одномерной бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме.

Вид потенциальной энергии: $\boldsymbol{U = 0}$ при $0 \le \boldsymbol{x} \le \boldsymbol{l}$ **;**

$\boldsymbol{U} = \infty$ при $\boldsymbol{x} < 0$ и $\boldsymbol{x} > \boldsymbol{l}$.

Вид уравнения Шредингера: $$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\psi = 0$$



За пределы потенциальной ямы частица попасть не может.

Поэтому вероятность обнаружения частицы вне ямы равна нулю.

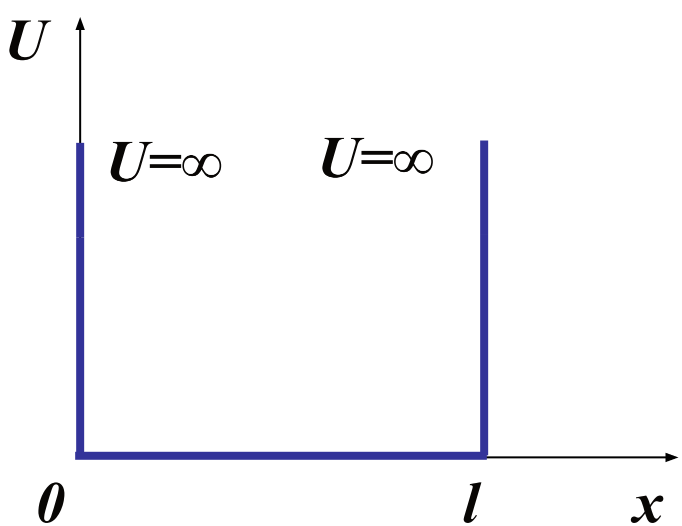
Следовательно, за пределами ямы $\psi = 0$

Частица в одномерной бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме.

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

Функция ψ должна быть непрерывной, следовательно, она должна быть равна нулю и на границах ямы:

$$\psi(0) = \psi(l) = 0$$



В области $x > 0$ и $x < l$ уравнение Шредингера имеет вид:

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

поскольку в этой области $U = 0$.

Частица в одномерной бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме.

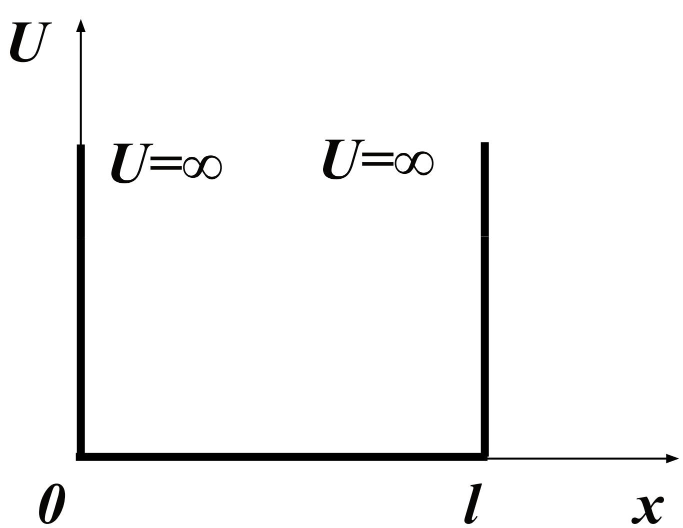
$$\boxed{\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\psi=0}$$

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

Решение - как в предыдущей задаче.

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

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+k^2\psi=0$$



Это уравнение колебаний. Решение:

$$\psi(x)=a\sin(kx+\alpha)$$

a, k и α- константы.

Определим α и k из граничных условий:

$$\psi(0)=\psi(l)=0$$

Частица в одномерной бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме.

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

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

$$\boxed{\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+k^2\psi=0}$$

Из условия $\psi(0)=0$ получим:

$$\psi(0)=a\sin\alpha=0 \Rightarrow \alpha=0$$

Второе граничное условие - $\psi(l)=0$:

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

Это соотношение выполняется при условии:

$$\psi(x)=a\sin(kx+\alpha)$$

$$kl=\pm n\pi \quad (n=1,\ 2,\ 3,\ \ldots). \Rightarrow k=\pm\frac{n\pi}{l}$$

Исследуем полученные решения.

$$k^2=\frac{2m}{\hbar^2}E \Rightarrow E=\frac{k^2\hbar^2}{2m}$$

1. ***Энергия*** частицы в потенциальной яме.

$$E=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}n^2, \quad (n=1,\ 2,\ 3,\ \ldots)$$

Частица в одномерной бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме.

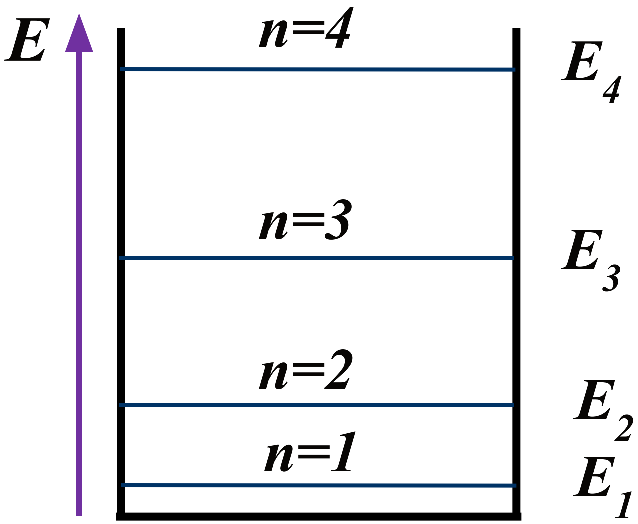
$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} n^2, \qquad n = 1,\ 2,\ 3,\ \ldots$$

Таким образом, стационарное уравнение Шредингера удовлетворяется только при собственных значениях энергии, зависящих от целого числа ***n***.

Следовательно, энергия E_n частицы принимает лишь *дискретные значения*, т.е. *квантуется*.

Частица в одномерной бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме.

Квантованные значения энергии $\boldsymbol{E_n}$ - это *уровни энергии*, а число $\boldsymbol{n}$, определяющее энергетические уровни частицы, - *главное квантовое число*.



Универсальный принцип природы: всякий объект стремится к состоянию с минимальной энергией.

Это характерно и для микрочастиц: наиболее устойчивым является состояние с минимальной энергией.

Стационарное состояние с минимальной энергией - ***основное состояние*** *(основной уровень)*. Все остальные стационарные состояния (уровни) - ***возбужденные***.

Частица в одномерной бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме.

2. Определим ***собственные*** значения функции $\psi(x)$.

Подставим в уравнение $\psi(x) = a\,sin(kx)$ значение $k = \pm\dfrac{n\pi}{l}$

$$\psi_n(x) = a\,sin(n\pi x / l)$$

Коэффициент ***a*** определим из условия нормировки ($\int_V |\Psi|^2 dV = 1$):

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

(Задача одномерная, интеграл по объему заменен на интеграл по координате x).

Результат интегрирования: $\dfrac{a^2 l}{2} = 1.$ Отсюда $a = \sqrt{2/l}$.

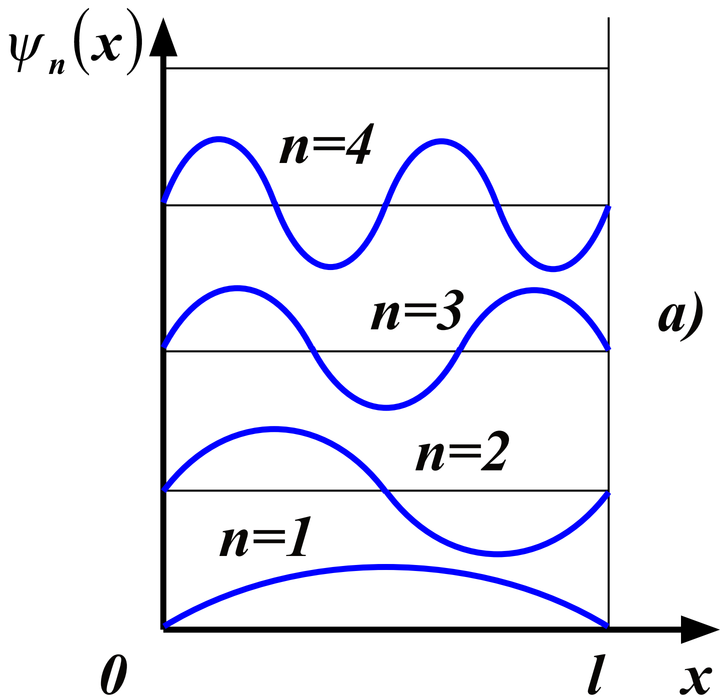
Окончательно: $\psi_n(x) = \sqrt{\dfrac{2}{l}}\, sin\left(\dfrac{n\pi}{l} x\right)$ (n = 1, 2, 3, …)

Частица в одномерной бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме.

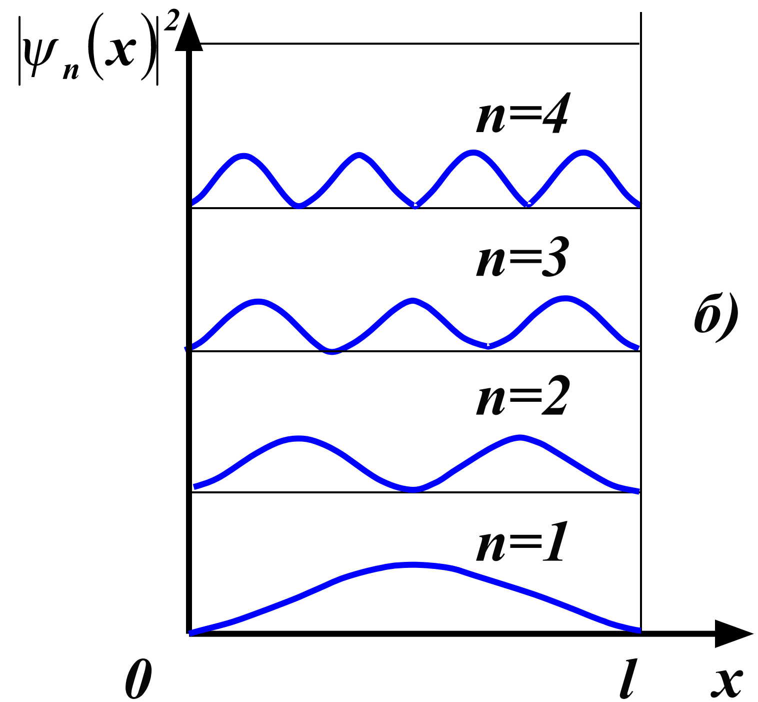
$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}}\, sin\left(\frac{n\pi}{l}x\right) \qquad (n = 1,\ 2,\ 3,\ \ldots)$$

Графики собственных функций - рисунок а).

Рисунок б) - плотность вероятности $|\psi_n(x)|^2$ обнаружения частицы на различных расстояниях от стенок ямы.

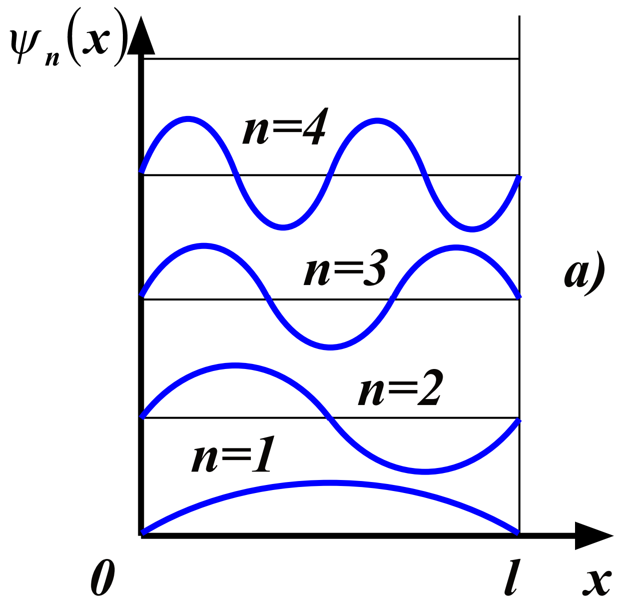


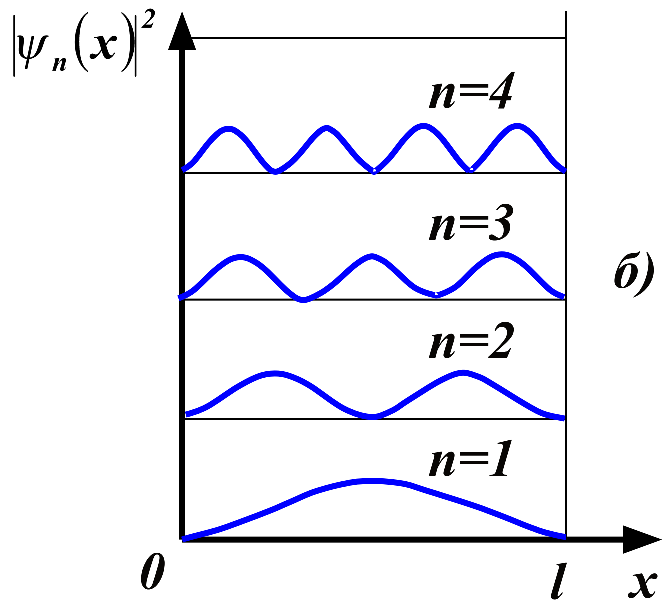
а)



б)

Частица в одномерной бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме.





Пример: в состоянии с $\boldsymbol{n}$ = 2 частица не может быть обнаружена в середине ямы и вместе с тем одинаково часто бывает как в левой, так и в правой половинах ямы.

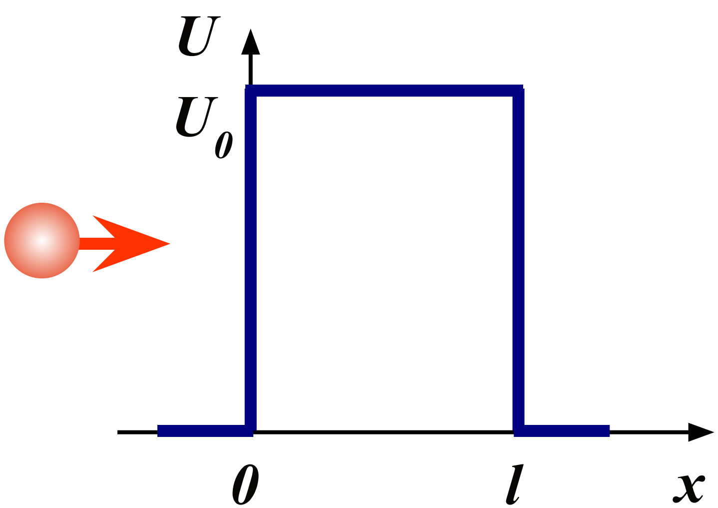
Такое представление частицы несовместимо с представлением о траекториях.

ПРОХОЖДЕНИЕ ЧАСТИЦЫ ЧЕРЕЗ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ БАРЬЕР

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***.

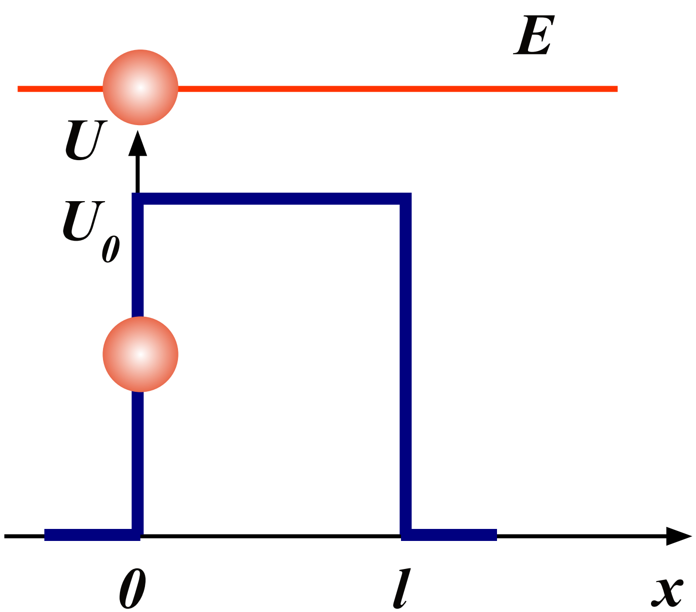


Пусть частица движется слева направо по оси x и встречает на своем пути прямоугольный потенциальный барьер высотой U_0 и шириной l.

ПРОХОЖДЕНИЕ ЧАСТИЦЫ ЧЕРЕЗ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ БАРЬЕР

Классические представления о поведении частицы.

1. $E > U_0$. Частица беспрепятственно проходит над барьером.



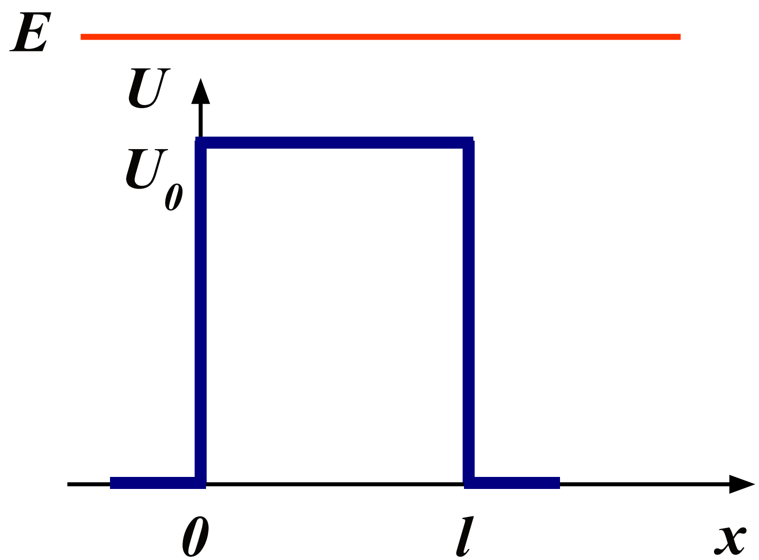
$0 \leq x \leq l$. Скорость частицы уменьшается; $x > l$ - скорость частицы постоянна.

2. $E < U_0$. Частица отражается от барьера и летит в обратную сторону. Сквозь барьер частица проникнуть не может.

ПРОХОЖДЕНИЕ ЧАСТИЦЫ ЧЕРЕЗ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ БАРЬЕР

Поведение частицы в квантовой механике.

1. $E > U_0$. Имеется ненулевая вероятность того, что частица отразится от барьера и полетит в обратную сторону.



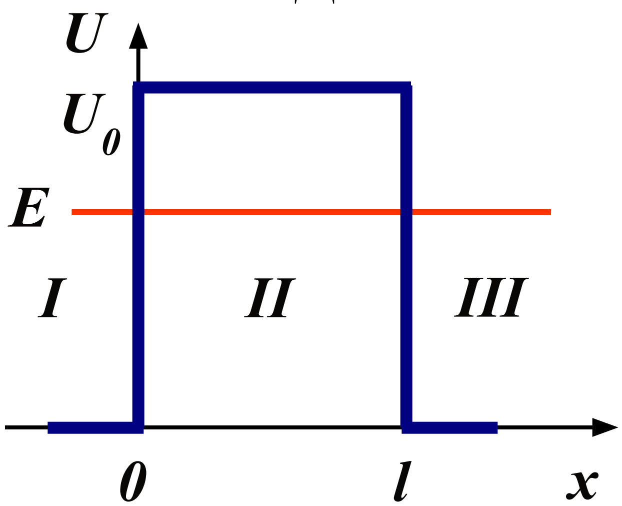
2. $E<U_0$. Частица может проникнуть через барьер и оказаться в области $x > l$.

Покажем это. Пусть $E<U_0$.

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

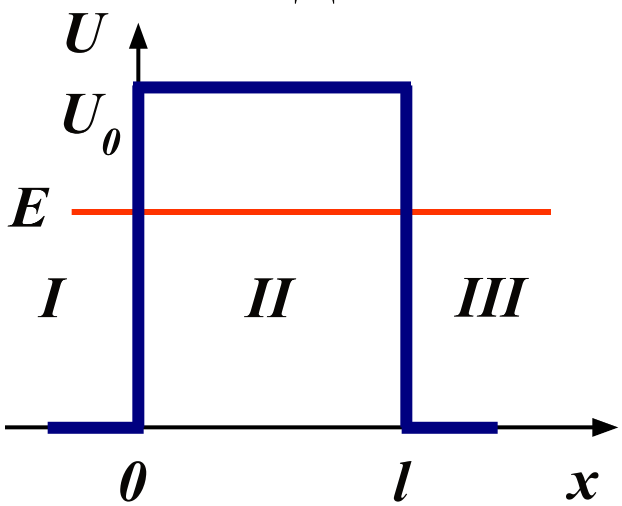
Введем обозначения:

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

С учетом этих обозначений:

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

ПРОХОЖДЕНИЕ ЧАСТИЦЫ ЧЕРЕЗ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ БАРЬЕР



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

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

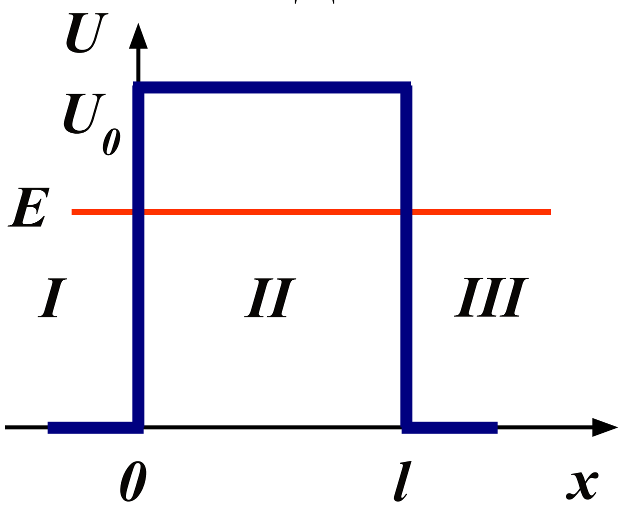
Как решить эти уравнения?

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

Заглянуть в соответствующий раздел курса «Элементы математического анализа»!

Такие уравнения 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 записывается в виде $\psi = exp(\lambda x)$, где λ - постоянная величина.

Итог - решения уравнений для трех выделенных областей :

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

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

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

Нужно найти значения констант A_1, A_3, B_1, B_2.

ПРОХОЖДЕНИЕ ЧАСТИЦЫ ЧЕРЕЗ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ БАРЬЕР

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

Константы определяются «сшиванием» уравнений на границах областей с помощью граничных условий: пси-функция должна удовлетворять условию *ограниченности*, *непрерывности,* не иметь изломов, т.е. должна быть *гладкой*.

Эта задача решена. Рассмотрим лишь некоторые выводы.

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

С позиций квантовой механики частица имеет *отличную от нуля вероятность* прохождения через потенциальный барьер конечной ширины.

ПРОХОЖДЕНИЕ ЧАСТИЦЫ ЧЕРЕЗ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ БАРЬЕР

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

В областях ***1*** 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 ***x***.

В области ***III*** - за барьером – есть только проходящая волна.

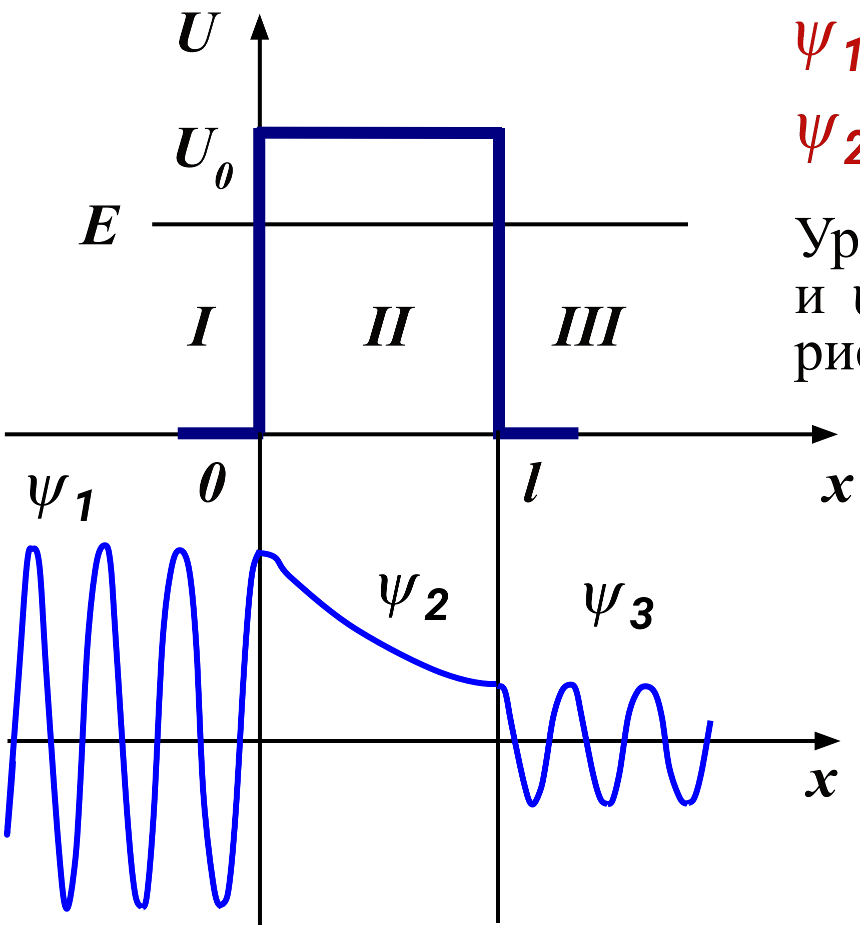
Вспомним, что волны, которые ассоциируются со свободно движущимися частицами, получили название *волн де Бройля.*

В области ***II*** функция не соответствует плоской волне.

ПРОХОЖДЕНИЕ ЧАСТИЦЫ ЧЕРЕЗ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ БАРЬЕР

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

$$\psi_2 = B_2 \exp(-\beta x) \quad \psi_3 = A_3 \exp(ikx)$$



Уравнения для функций ψ_1, ψ_2 и ψ_3 качественно иллюстрируется рисунком.

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

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

ПРОХОЖДЕНИЕ ЧАСТИЦЫ ЧЕРЕЗ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ БАРЬЕР

При преодолении потенциального барьера частица как бы пробивает «туннель» в барьере. Это явление называется *туннельным эффектом.*

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).

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

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

Очевидно, что $D + R = 1$