ДВИЖЕНИЕ СВОБОДНОЙ ЧАСТИЦЫ В ОДНОМЕРНОЙ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЯМЕ

1. Движение свободной частицы
2. Частица в одномерной прямоугольной яме с бесконечными внешними «стенками»
3. Гармонический осциллятор
4. Прохождение частиц сквозь потенциальный барьер. Туннельный эффект.

1. Движение свободной частицы

Свободная частица – частица, движущаяся в отсутствие внешних полей.

Т.к. на свободную частицу (пусть она движется вдоль оси x) силы не действуют, то потенциальная энергия частицы U(x)=const и ее можно принять равной нулю: (U=0)
Тогда **полная** энергия частицы совпадает с ее **кинетической** энергией.
В таком случае уравнение Шредингера для стационарных состояний примет вид

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

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

Прямой подстановкой можно убедиться в том, что частным **решением уравнения** является функция

$$\Psi(x) = Ae^{ikx}$$

где **A=const** и **k=const**, с собственным значением энергии:

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

Зависимость энергии от импульса

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

оказывается **обычной для нерелятивистских частиц.**

Следовательно, **энергия свободной частицы может принимать любые значения** (т.к. число может принимать любые значения), т.е. ее **энергетический спектр является непрерывным**.

Таким образом, свободная частица описывается плоской монохроматической волной де Бройля.

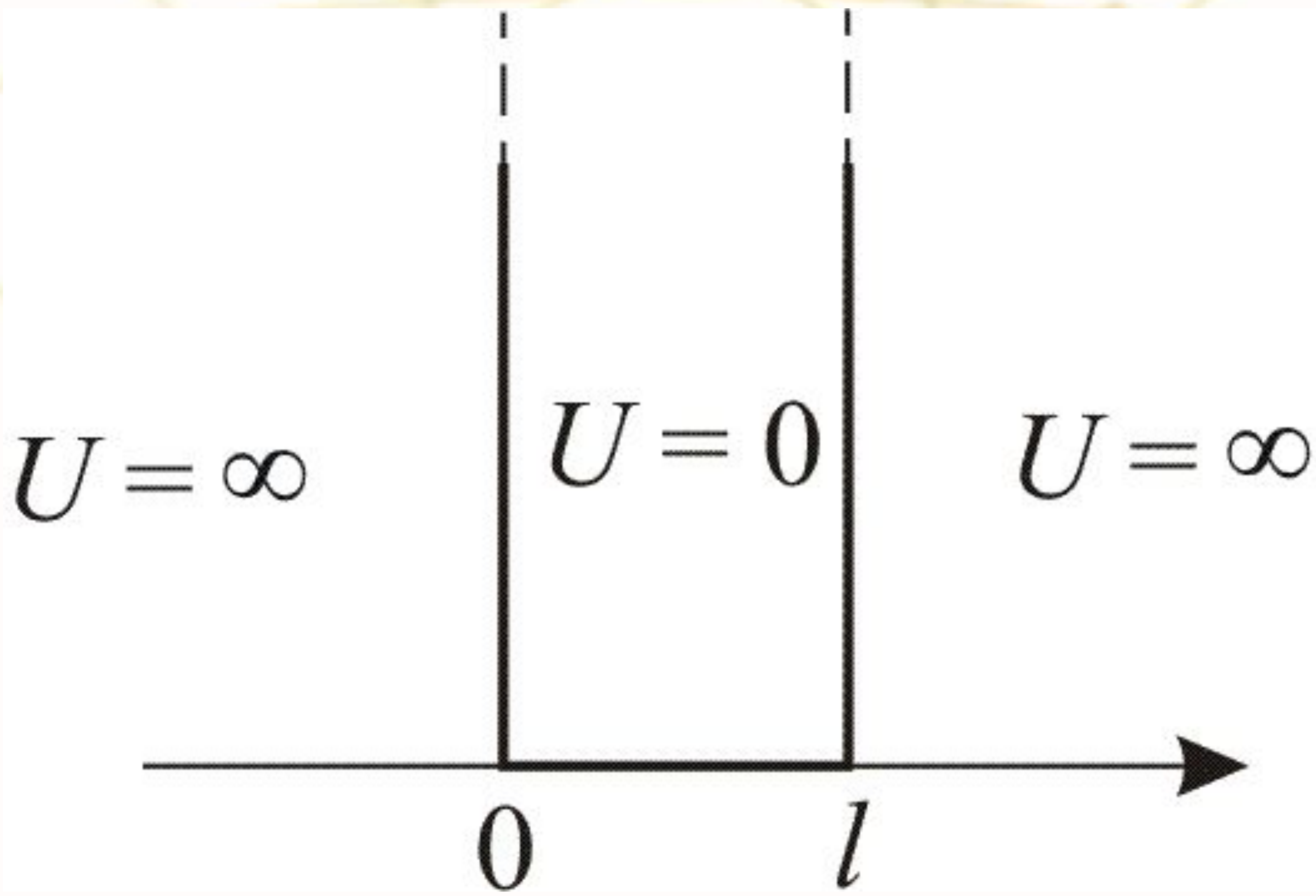
Этому способствует **не зависящая от времени плотность вероятности обнаружения частицы в данной точке пространства.**

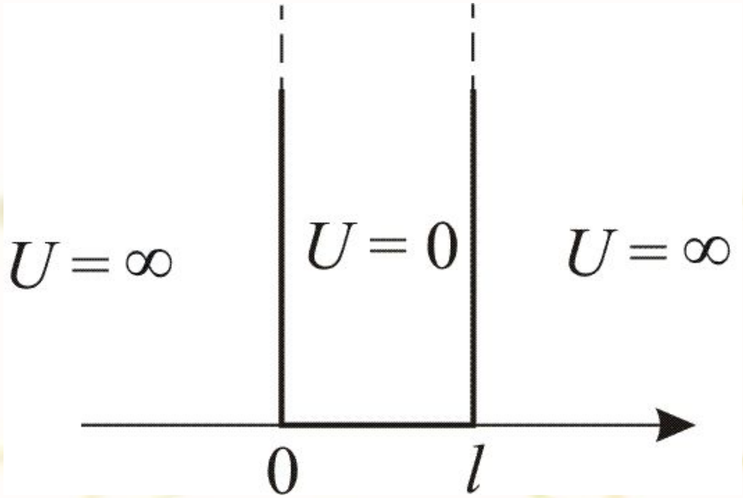
$$\boxed{|\Psi|^2 = \Psi\Psi^* = |A|^2}$$

т.е. **все положения свободной частицы являются равновероятностными.**

2. Частица в одномерной прямоугольной яме с бесконечными внешними «стенками»

Проведем качественный анализ решений уравнения Шредингера, применительно к частице в яме с бесконечно высокими «стенками».





Такая яма описывается потенциальной энергией вида

$$U(x)=\begin{cases}\infty, x<0\\ 0, 0\le x\le l\\ \infty, x>l\end{cases}$$

где 1 – ширина «ямы», энергия отсчитывается от ее дна. (для простоты принимая, что частица движется вдоль оси x)

Уравнение Шредингера для стационарных состояний в случае одномерной задачи запишется в виде:

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

По условию задачи (бесконечно высокие «стенки»), **частица не проникает за пределы «ямы», поэтому вероятность ее обнаружения,** (а следовательно, и волновая функция) **за пределами «ямы» равна нулю.**

На границах ямы волновая функция также должна обращаться в нуль. Следовательно, **граничные условия** в таком случае имеют вид

$$\Psi(0) = \Psi(l) = 0$$

В пределах «ямы» ($0 \leq \mathbf{x} \leq \mathbf{l}$) уравнение Шредингера сведется к уравнению

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

где $k^2 = \dfrac{2mE}{\hbar^2}$.

Общее решение дифференциального уравнения

$$\boxed{\Psi(x) = A \sin kx}$$

Уравнение $\Psi(l) = A \sin kl = 0$ выполняется только при

$$\boxed{k = \frac{n\pi}{l}}$$

Отсюда следует, что:

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

где $n = 1, 2, 3\ldots$

Т.е. стационарное уравнение Шредингера описывающее движение частицы в «потенциальной яме» с бесконечно высокими «стенками», удовлетворяется только при собственных значениях E_n, зависящих от целого числа n.

Следовательно, **энергия E_n частицы** в «потенциальной яме» с бесконечно высокими «стенками» **принимает лишь определенные дискретные значения, т.е. квантуется**.

Квантовые значения энергии E_n называется **уровнями энергии**, а число n, определяющее энергетические уровни **- главным квантовым числом.**

Таким образом, **микрочастица** в «потенциальной яме» с бесконечно высокими «стенками» **может находиться только на определенном энергетическом уровне E_n**, или как говорят, частица **находится в квантовом состоянии n.**

Найдем собственные функции: $$\Psi_n(x) = A\sin\frac{n\pi}{l}x.$$

Постоянную интегрирования А найдем из условия нормировки:

$$A^2\int_0^l \sin^2\frac{\pi n}{l}x\mathrm{d}x = 1$$

В результате интегрирования получим $$\boxed{A = \sqrt{\frac{2}{l}}}$$

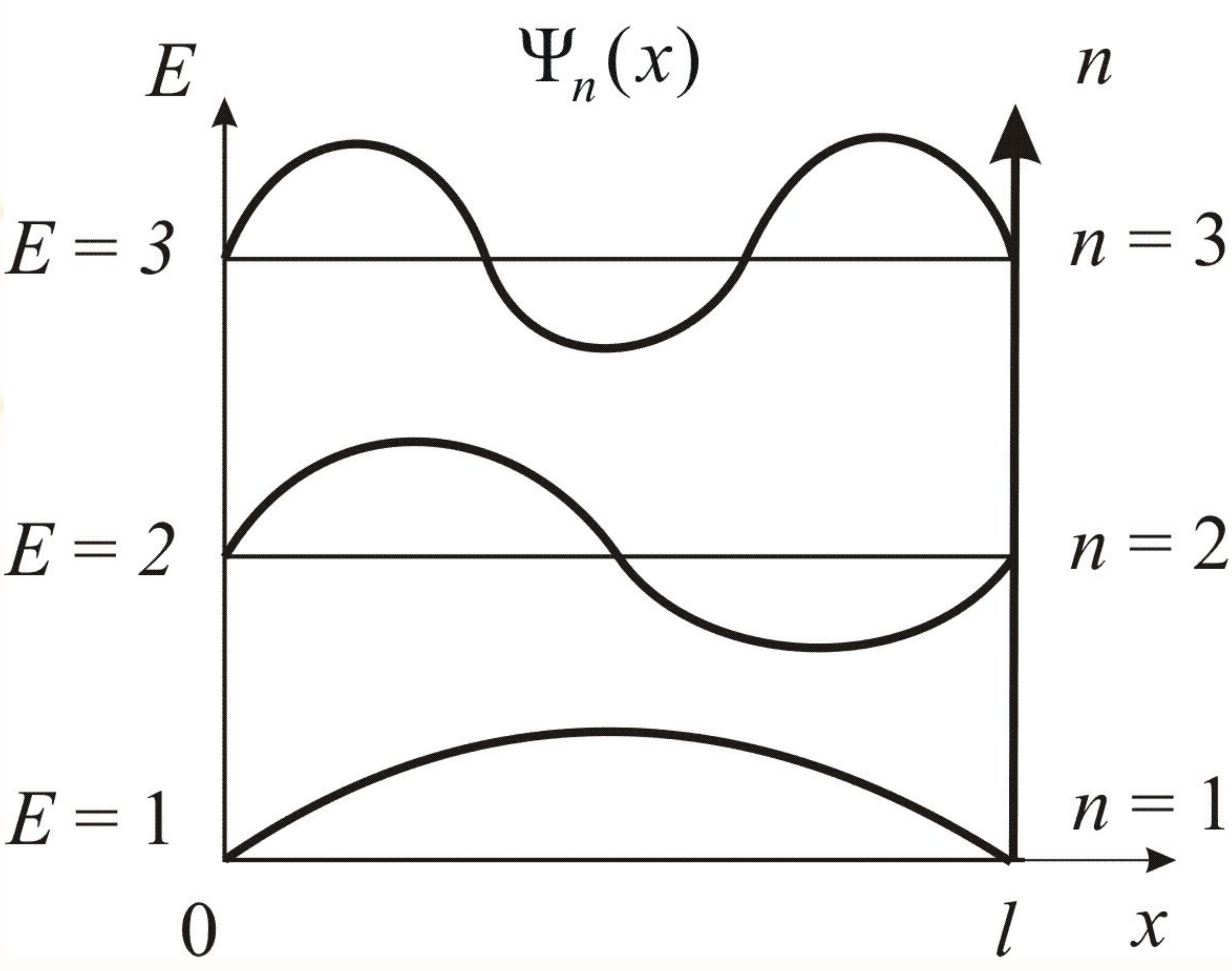
Соответственные функции будут иметь вид:

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

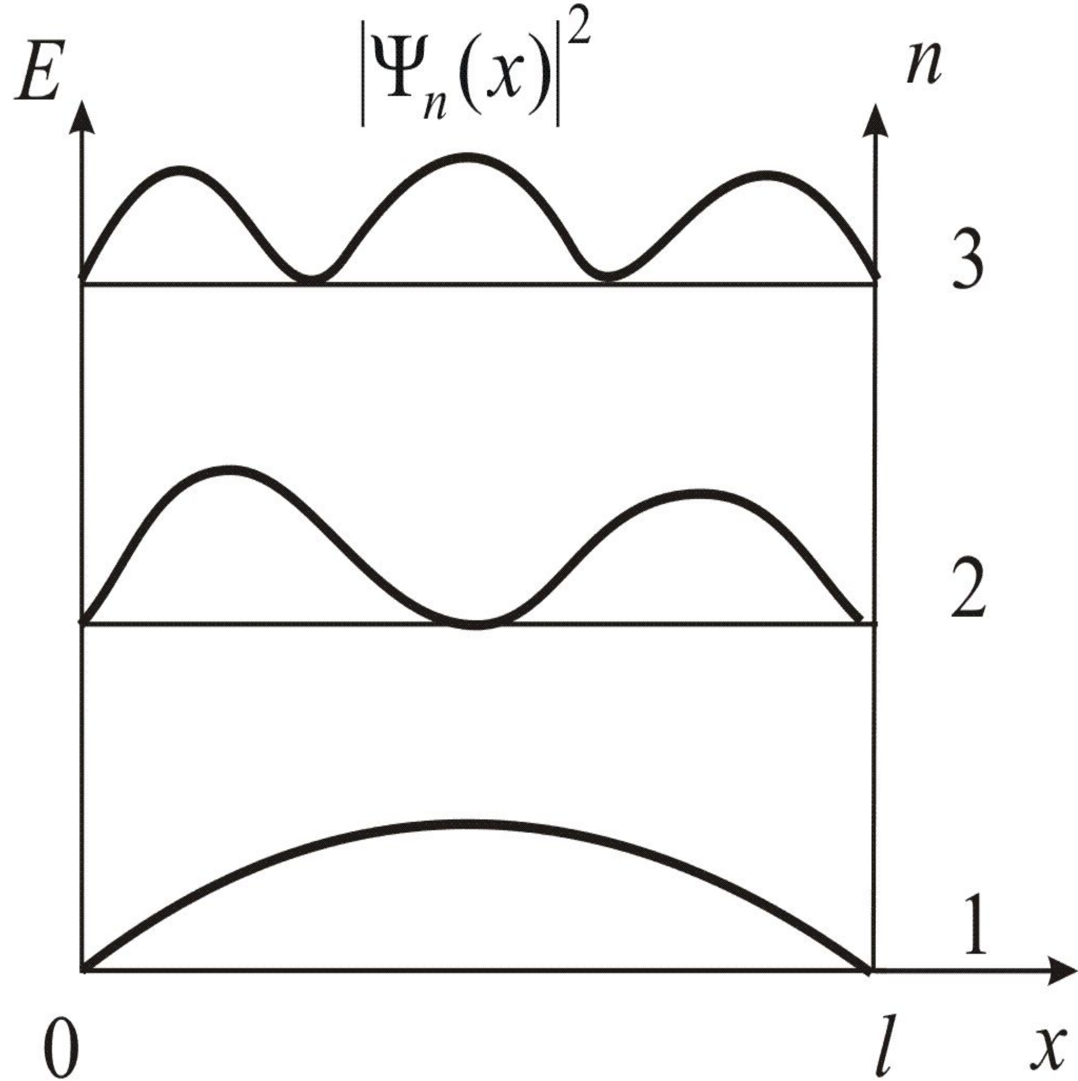
где $n = 1, 2, 3\ldots$

Графики собственных функций соответствующие уровням энергии при
n = 1, 2, 3…

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



Плотность вероятности $|\Psi(x)|^2$ обнаружения частицы на различных расстояниях от «стенок» ямы для n = 1,2,3



В квантовом состоянии с n = 2 частица не может находиться в центре ямы, в то время как одинаково может пребывать в ее левой и правой частях.

Из выражения

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

следует, что **энергетический интервал между двумя соседними условиями** равен

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

Например, для электрона при размерах ямы l=10^{-10}м (свободные электроны в металле)

$\Delta E_n \approx 10^{-35}$ *n Дж ≈ 10^{-16} *n Эв,

т.е. энергетические уровни расположены столь тесно, что спектр можно считать практически непрерывным.

Если же размеры ямы соизмеримы с размерами стенки ($l \approx 10^{-10}$ м), то для электрона

$$\Delta E_n \approx 10^{-17} *n \text{ Дж} \approx 10^{-2} *n \text{ Эв},$$

т.е. получаются явно дискретные значения энергии (линейчатый спектр).

Т.о., **применение уравнения Шредингера** к частице в «потенциальной яме» с бесконечно высокими “стенками” **приводит к квантовым значениям энергии**, в то время как классическая механика на энергию этой частицы лишних ограничений не накладывает.

Кроме того, **квантово-механическое рассмотрение этой задачи** приводит к выводу, что **частица в потенциальной яме** с бесконечно высокими «стенками» **не может иметь энергию,** меньшую, чем минимальная энергия равная

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2}$$

Наличие отличной от нуля минимальной энергии не случайно и вытекает **из соотношения неопределенностей.**

Неопределенность координаты Δx частицы в яме шириной l равна $\boldsymbol{\Delta x = l}$.

Тогда согласно соотношению неопределенностей, **импульс не может иметь точное**, в данном случае, **нулевое**, значение. **Неопределенность импульса:**

$$\Delta p \approx \frac{\hbar}{l}.$$

Такому разбросу значений импульса соответствует **минимальная кинетическая энергия:**

$$\boxed{E_{\min} \approx \frac{\Delta p^2}{2m} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}}$$

При больших квантовых числах n>>1

$$\frac{\Delta E_n}{E_n} \approx \frac{2}{n} << 1$$

т.е. **соседние уровни расположены тесно: тем теснее, чем больше n**.

Если n очень велико, то можно говорить о практически непрерывной последовательности уровней и характерная особенность квантовых процессов **– дискретность – сглаживается.**

Этот результат является частным случаем **принципа соответствия Бора** (1923 г.) согласно которому законы квантовой механики должны при больших значениях квантовых чисел переходить в законы классической физики.

Принцип соответствия:

всякая новая, более общая теория, являющаяся развитием классической, не отвергает ее полностью, а включает в себя классическую теорию, указывая границы ее применимости, причем в определенных предельных условиях новая теория переходит в старую.

3. Гармонический осциллятор

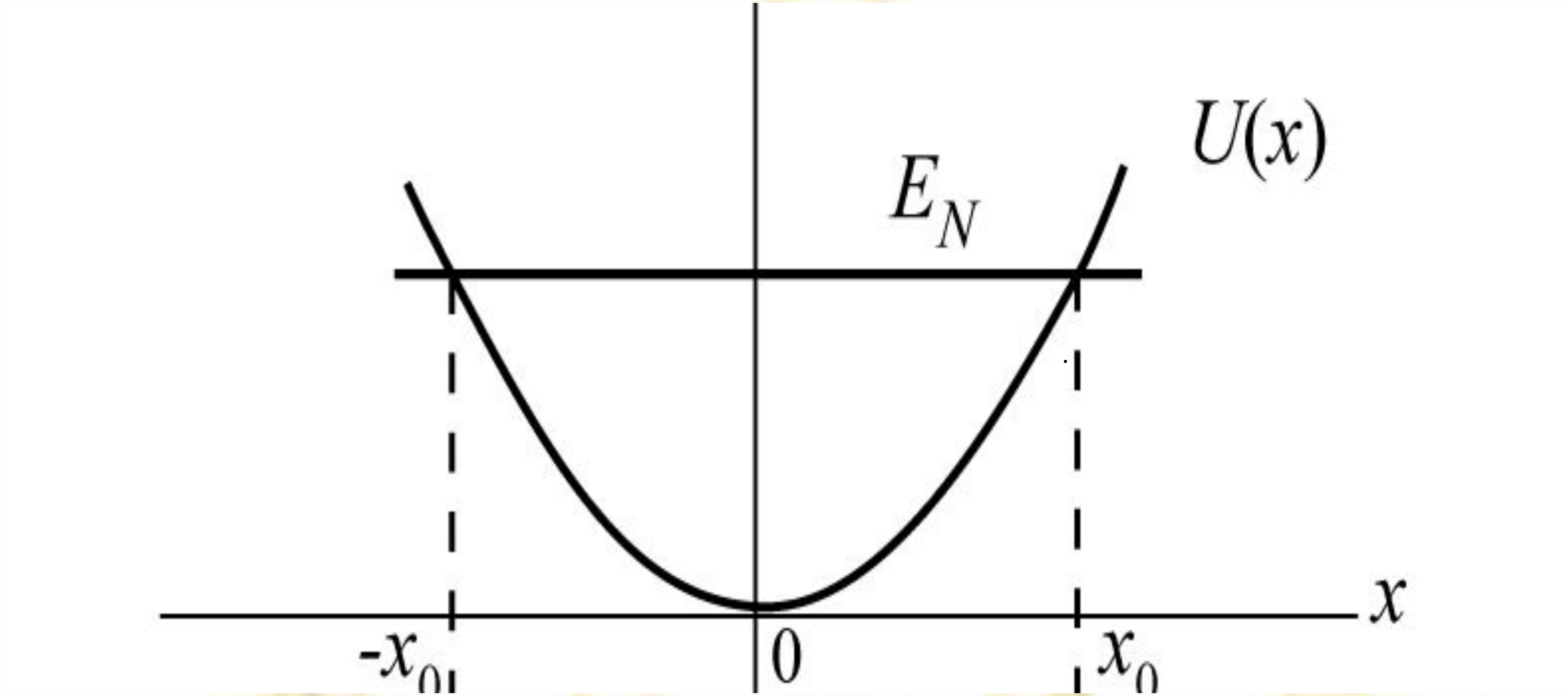
Гармоническим осциллятором называют частицу, совершающую одномерное движение под действием квазиупругой силы F=kx

Потенциальная энергия частицы $U = kx^2/2$

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

где $\omega = \sqrt{k/m}$

График потенциальной энергии частицы:



В точках с координатами **$-x_0$ и $+x_0$**, полная энергия равна потенциальной энергии. Поэтому **с классической точки зрения частица не может выйти за пределы области $-x_0$ и $+x_0$**

Гармонический осциллятор в квантовой механике - квантовый осциллятор - описывается уравнением Шредингера:

$$\boxed{\frac{d^2\Psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-\frac{m\omega^2x^2}{2}\right)\Psi=0}$$

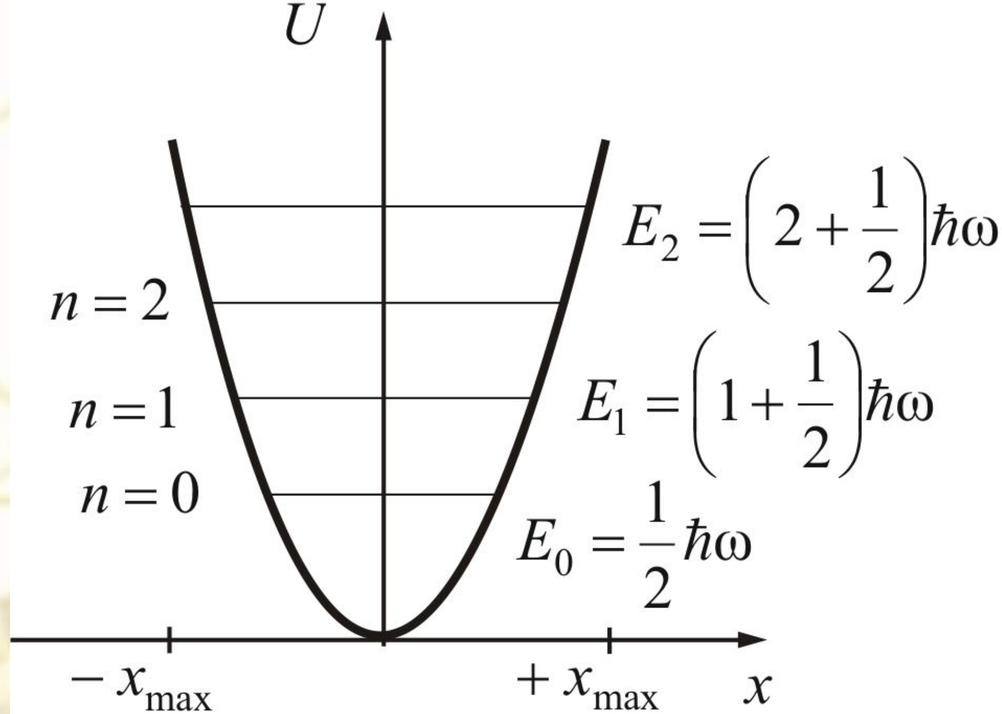
Значения **полной энергии** осциллятора

$$E_n=(n+1/2)\hbar\omega$$

где $n = 0, 1, 2\ldots$

$\Delta E_n = \hbar\omega$ и

не зависит от n.



Минимальная энергия

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

называется нулевой энергией, т.е. при Т = 0К колебания атомов в кристаллической решетке не прекращаются.

Это означает что частица не может находиться на дне потенциальной ямы.

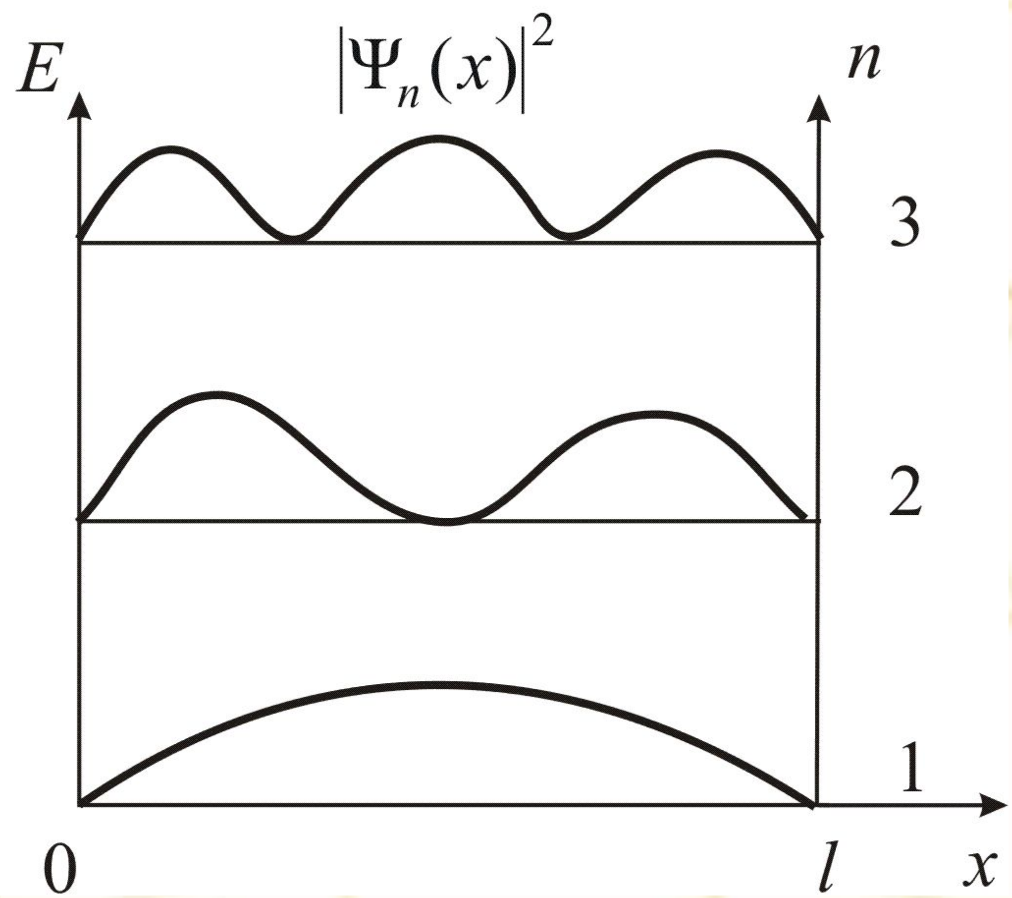
В квантовой механике вычисляется вероятность различных переходов квантовой системы из одного состояния в другое.
Для гармонического осциллятора возможны лишь переходы между соседними уровнями.

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

$$\Delta n = \pm 1$$

Плотность вероятности нахождения частицы

$$|\Psi|^2 = \Psi \cdot \Psi^*$$



При **n = 2** в середине ямы частицы быть не может.

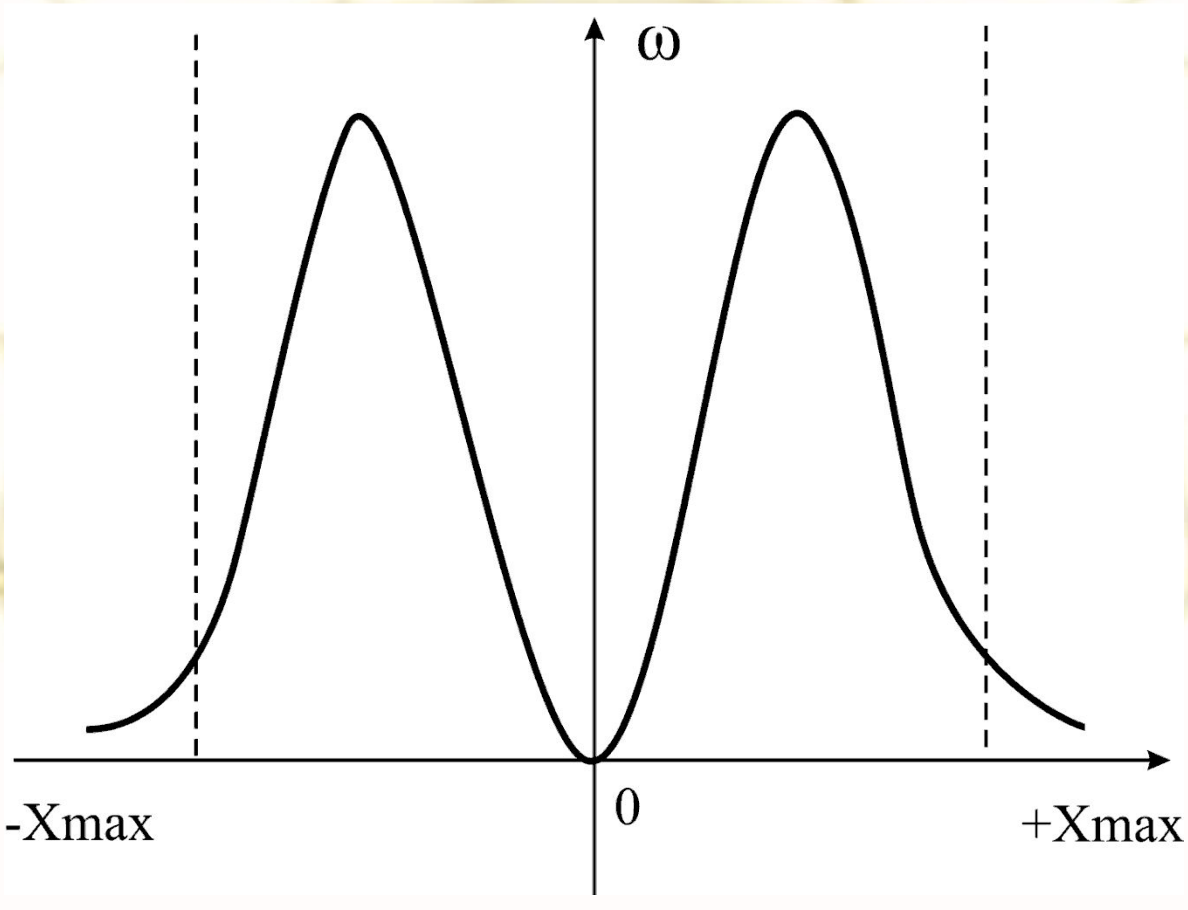
Таким образом, энергия гармонического осциллятора изменяется только порциями, т.е. **квантуется**

$$E_n = n\hbar\omega$$

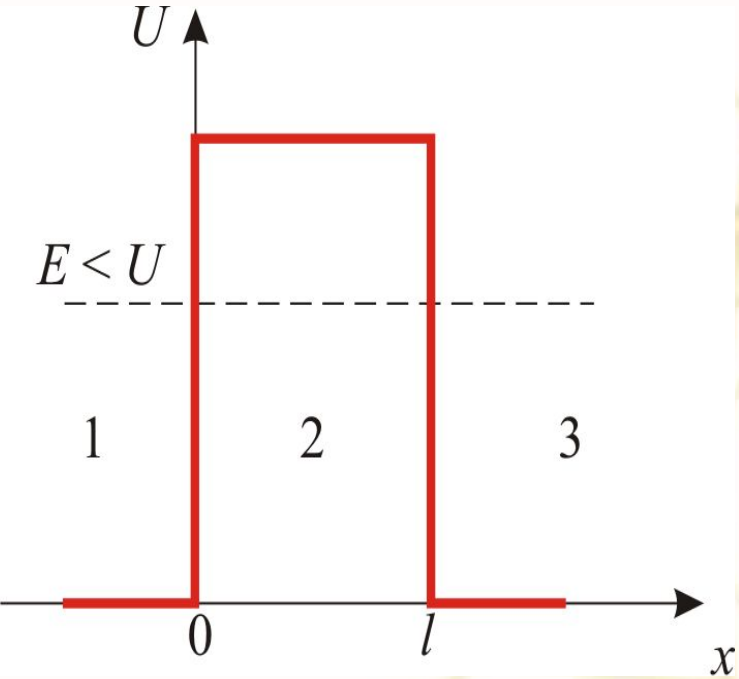
Причем минимальная порция энергии $$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

Кроме того например, при n = 2 в середине сосуда частицы быть не может.

Кроме того, квантово – механический расчет показывает, что частицу **можно обнаружить** и за пределами ямы, т.е. в области с координатами $-x_0$ и $+x_0$, в то время как с классической точки зрения она не может выйти за пределы этой ямы.



4. Прохождение частиц сквозь потенциальный барьер. Туннельный эффект

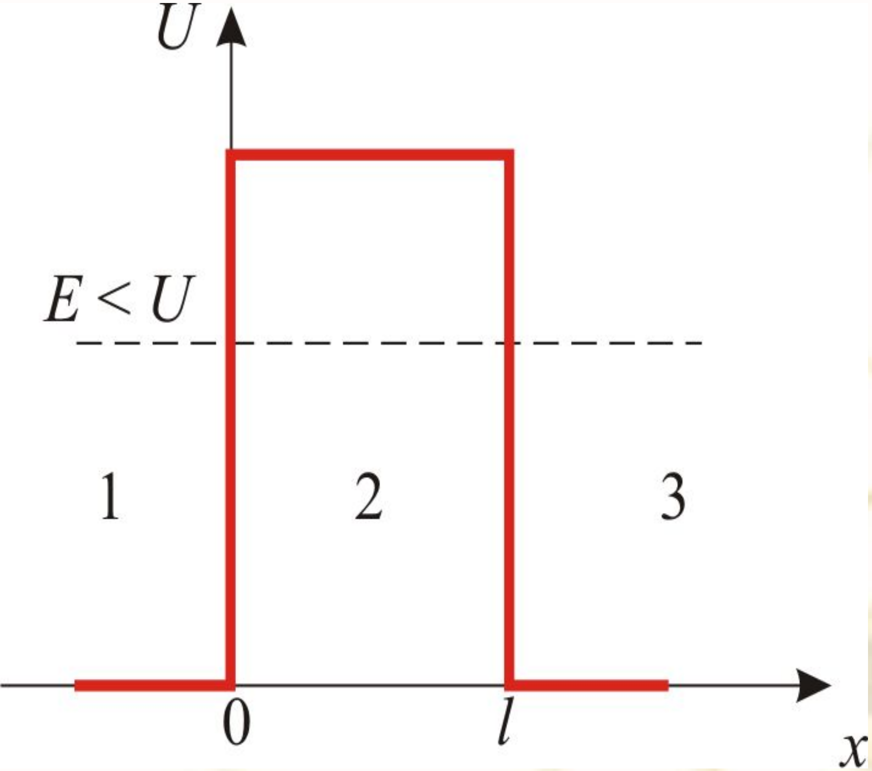


Рассмотрим простейший потенциальный барьер прямоугольной формы высоты U и шириной l для одномерного (по оси x) движения частицы.

$$U(x) = \begin{cases} 0, x < 0 & 1\,обл. \\ U, 0 < x < 1 & 2\,обл. \\ 0, \ x > 1 & 3\,обл. \end{cases}$$

При данных условиях задачи классическая частица, обладая энергией E:

- либо беспрепятственно пройдет **над барьером**,
- либо **отразится** от него (E < U) и будет двигаться в обратную сторону, т.е. она не может проникнуть через барьер.



Для микрочастицы же, даже при E > U, имеется **отличная от нуля** возможность, что частица отразится от барьера и будет двигаться в обратную сторону.

При **E < U имеется также отличная от нуля вероятность, что** частица окажется в области x > l, т.е. проникнет сквозь барьер.

Такой вывод следует непосредственно из решения уравнения Шредингера, описывающего движение микрочастицы при данных условиях задачи.

Уравнение Шредингера для состояний для каждой их выделенных областей имеет вид:

$$\frac{\partial^2 \Psi_{1,3}}{\partial x^2} + k^2 \Psi_{1,3} = 0 \qquad \left(\textit{для}\ 1,3\ \textit{обл.}\ k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \right)$$

$$\frac{\partial^2 \Psi_{2}}{\partial x^2} + q^2 \Psi_{2} = 0 \qquad \left(\textit{для}\ 2\ \textit{обл.}\quad q^2 = \frac{2m(E-U)}{\hbar^2} \right)$$

Здесь $\boldsymbol{q = i\beta}$ *– мнимое число,* $\beta = \frac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar}$.

Общее решение этих дифф. уравнений:

$$\Psi_1(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} \quad (1)$$

$$\Psi_2(x) = A_2 e^{ikx} + B_2 e^{-ikx} \quad (2)$$

$$\Psi_3(x) = A_3 e^{ikx} + B_3 e^{-ikx} \quad (3)$$

Учитывая значение **q** и то, что $A_1 = 1$, $B_3 = 0$, получим **решение уравнения Шредингера** для **трех областей** в следующем виде:

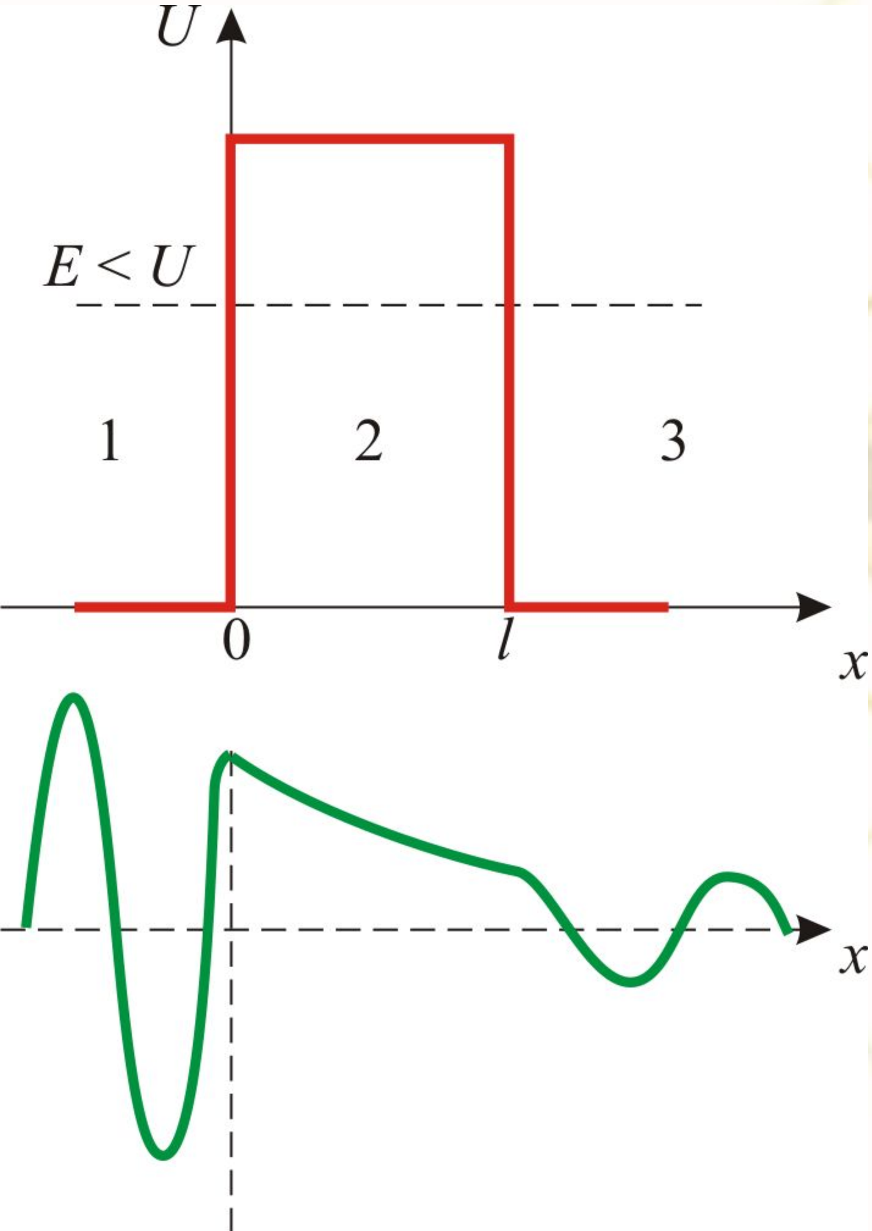
$$\Psi_1(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} \quad (1)$$

$$\Psi_2(x) = A_2 e^{-\beta x} + B_2 e^{\beta x} \quad (2)$$

$$\Psi_3(x) = A_3 e^{ikx} \quad (3)$$

В области 2 функция уже не соответствует плоским волнам, распространяющимся в обе стороны, поскольку показатели степени не мнимые а действительные.

Качественный анализ функций $\Psi_1(x)$, $\Psi_2(x)$, $\Psi_3(x)$ показан на рис.



1. В области 1 плоская волна де Бройля.

2. Волновая функция не равна нулю и внутри барьера, хотя уже не соответствует плоским волнам де Бройля

3. В области 3, если барьер не очень широк, будет опять иметь вид волн де Бройля с тем же импульсом, т.е. с той же частотой, но с **меньшей амплитудой.**

Таким образом, квантовая механика приводит к принципиально новому квантовому явлению - туннельному эффекту, в результате которого микрообъект может пройти через барьер.

Коэффициент прозрачности для барьера прямоугольной формы

$$\boxed{D = D_0 exp\left(-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U-E)l}\right)}$$

Для барьера произвольной формы

$$D = D_0 exp\left(-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2m(U-E)l}\,\mathrm{d}x\right)$$

Прохождение частицы сквозь барьер **можно пояснить соотношением неопределенностей**:

Неопределенность импульса на отрезке $\Delta x = l$ составляет

$$\Delta p > \frac{h}{l}.$$

Связанная с этим разбросом в значении импульса **кинетическая энергия** может оказаться достаточной для того, чтобы полная энергия оказалась больше потенциальной.

$$K = \frac{\Delta p^2}{2m}$$

С классической точки зрения прохождение частицы сквозь потенциальный барьер при **Е < U невозможно**, так как частица, находясь в области барьера, должна была бы обладать отрицательной кинетической энергией.

Туннельный эффект является **специфическим квантовым эффектом**.

Основы теории туннельных переходов заложены работами **советских ученых Л.И. Мандельштама и М.А. Леонтовича в 1928 г.**

Туннельное прохождение сквозь потенциальный барьер лежит в **основе многих явлений:**

- физики твердого тела (например, явления в контактном слое на границе двух полупроводников),

- атомной и ядерной физики (например, α-распад, протекание термоядерных реакций).