Стационарные задачи квантовой механики

Стационарные квантовые состояния

Свойства волновой функции

Одномерная потенциальная яма

Прямоугольная потенциальная ступенька

Квантовый гармонический осциллятор

Туннельный эффект

Волновое уравнение Шредингера

Для описания волновых свойств частиц в каждом конкретном случае надо знать волновое уравнение, его решение, которым является волновая функция Ψ, и как интерпретировать Ψ – функцию.

В случае частиц , Э. Шредингер (Австрия, 1926г) предложил уравнение

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + U\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$, или $$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi + U\Psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi$$ в одномерном случае.

Волновая функция в общем случае является **комплексной**.

Операторы физических величин.

Макс Борн и другие исследователи сформулировали постулат, утверждающий, что каждой физической величине соответствует математический **оператор**, обладающий определенными свойствами.

Соотношения между операторами имеет ту же структуру, что и соотношения между физическими величинами в классической механике.

Например, уравнение Шредингера можно записать в символическом (операторном) виде как

$$\frac{\hat{p}^2}{2m}\Psi + U\Psi = \hat{E}\Psi$$

(Операторы обозначены «шляпками»)

Примеры операторов для одномерного движения частиц

Под оператором понимают математическое правило по которому одна функция
преобразуется в другую (оператор дифференцирования, оператор умножения, и др.).
В формулах оператор действует на функцию, стоящую справа от него.

Найдём операторы $\hat{p}_x$ $\hat{p}_x^2$ и $\hat{E}$. Воспользуемся плоской волной де Бройля ,
ко… стным решением уравнения Шредингер

$$\Psi(x,t) = Ae^{i\left(\frac{p_x}{\hbar}x - \frac{E}{\hbar}t\right)} \rightarrow \frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{E}{\hbar}\Psi \rightarrow \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)\Psi = E\cdot\Psi \rightarrow \hat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$$

$$\frac{\partial\Psi}{\partial x} = \frac{ip}{\hbar}\Psi \rightarrow \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi = p_x\cdot\Psi \rightarrow \hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \rightarrow \hat{p}_x^2 = \hat{p}_x\hat{p}_x = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)$$

Используя найденные операторы, получим

$$\frac{\hat{p}_x^2}{2m}\Psi + U\Psi = \hat{E}\Psi \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + U\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$, $\hat{U}$ - оператор умножения, $\hat{U}\Psi = U\Psi$

В трехмерном вариант: $\hat{p} = -i\hbar\nabla$, $\hat{p}^2 = -\hbar^2\nabla^2$, $\nabla = \vec{e}_x\frac{\partial}{\partial x} + e_y\frac{\partial}{\partial y} + e_z\frac{\partial}{\partial z}$

$$\frac{\hat{p}^2}{2m}\Psi + U\Psi = \hat{E}\Psi \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + U\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

Стационарные состояния

Волновая функция стационарного состояния частицы имеет вид

$$\Psi = \psi(x, y, z) \cdot e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$, где функция $\psi(x, y, z)$

является решением стационарного уравнения Шредингера

$$\hat{H}\psi = E\psi$$ **или** $$\nabla^2\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\psi = 0$$

где

1 **потенциальная энергия** $U(x, y, z)$ **явно не зависит от времени,**

2 **полная энергия в каком-либо квантовом состоянии имеет определенное значение,**

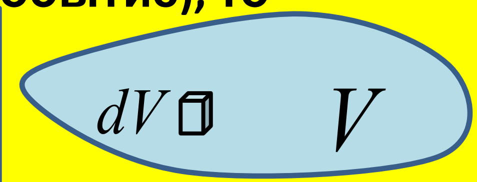
3 **плотность вероятности** $\rho_W = |\psi|^2$ **и вероятность обнаружения частицы в какой-либо области пространства не зависит от времени.**

Свойства волновой функции

Уравнение Шредингера – линейное дифференциальное уравнение, для которого выполняется **принцип суперпозиции**: Если ψ_1 и ψ_2 – решения уравнения, то функция $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ с произвольными постоянными коэффициентами c_1 и c_2 тоже является решением этого же волнового уравнения. **Принцип суперпозиции** необходимый для объяснения волновых свойств частиц, **и вероятностный смысл волновых функций определяют их свойства.**

1. Из понятия **плотности вероятности** $\rho = |\Psi|^2$ следует **условие нормировки**: **Если известно, что частица находится в объеме V (достоверное событие), то**

$$\int_V |\Psi|^2 dV = 1$$

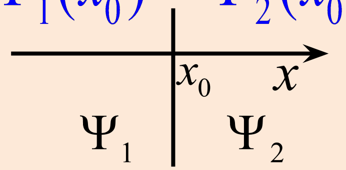


2. Ψ – функция должна быть **конечной и однозначной**. **Только при этом её физическая интерпретация как амплитуда вероятности имеет смысл**.

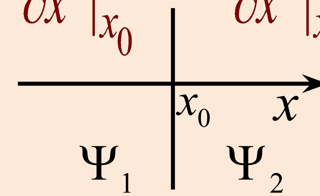
Свойства волновой функции (продолжение)

3. Ψ – **непрерывная** и **гладкая** **функция.**

$$\Psi_1(x_0)=\Psi_2(x_0)$$



$$\left.\frac{\partial\Psi_1}{\partial x}\right|_{x_0}=\left.\frac{\partial\Psi_2}{\partial x}\right|_{x_0}$$



4. Волновая функция Ψ **описывает квантовое состояние** частиц. Она содержит в себе всю возможную информацию о состоянии частицы.

Допускает опытную проверку в том смысле, что позволяет вычислить вероятности возможных результатов экспериментальных измерений

5.Кроме указанных стандартных ограничений на функцию Ψ могут накладываться **дополнительные условия из соображений симметрии.**

Стационарные задачи квантовой механики

1 Частица в одномерной потенциальной яме с непроницаемыми стенками

Для того, чтобы выполнялось уравнение Шредингера

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

для одномерного движения частицы вдоль оси *x*, ψ - функция вне ямы должна обращаться в ноль. $U\to\infty, \quad \psi\to 0$

.

Задача сводится к решению уравнения Шредингера

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0$$

, где $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E$

внутри ямы: $0 < x < L$ $, U = 0$

с граничными условиями: $\psi(0) = 0, \quad \psi(L) = 0$

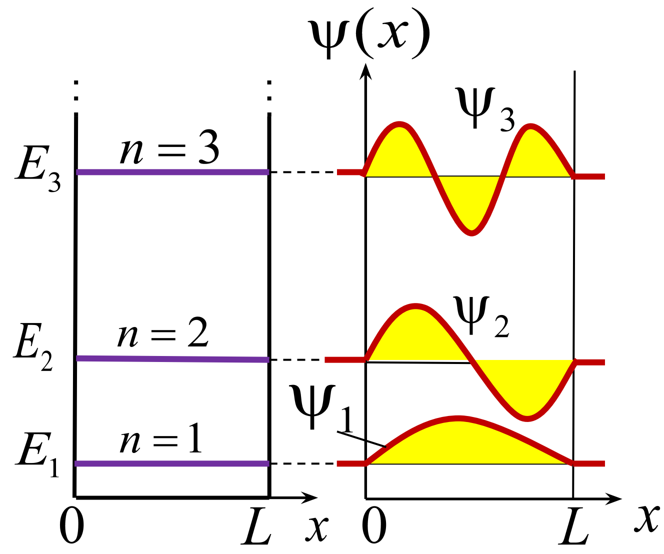


Рис.1. Одномерная потенциальная яма с непроницаемыми стенками

Решение уравнения $\frac{d^2\psi}{dx^2}+k^2\psi=0$ хорошо известно из теории колебаний.

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

Запишем это решение в виде $\psi(0)=0$ $x=0$ $\alpha=0$

Из граничного условия $\psi(L)=0$ при следует, что .

Другое граничное условие **приводит к квантованию энергии:**

$$x=L,\ \psi(L)=0, \quad \rightarrow \quad \sin kL=0, \quad \rightarrow \quad k_nL=n\pi, \qquad n=1,2,3,\cdots$$

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

$$k_nL=n\pi,$$

$$E_n=\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}n^2, \qquad n=1,2,3,\cdots$$

где ***n* – квантовое число**, а соответствующее ему значение E_n называется

уровнем энергии.

Первые три уровня энергии изображены на рис.1, слева. Состояние частицы

с наименьшей энергией $E_1=\pi^2\hbar^2/2mL^2$, ($n=1$) называется

основным* (невозбужденным) *состоянием,

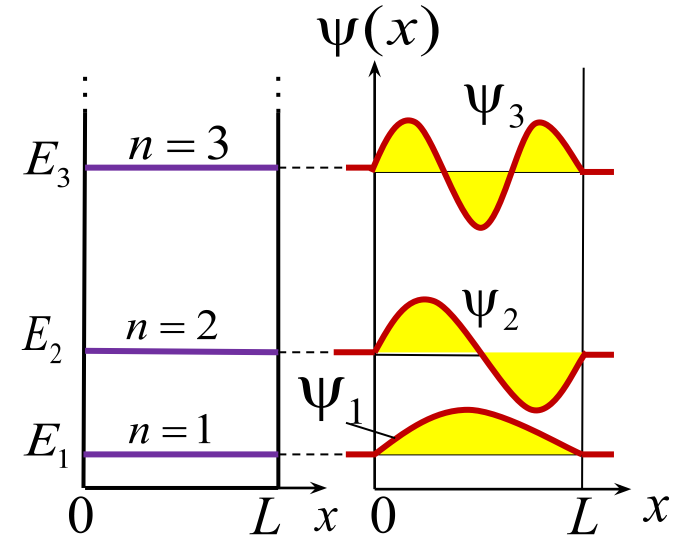
все остальные состояния являются ***возбужденными.***

Волновые функции частицы:

$$\psi_n(x) = A\sin k_n x = A\sin\frac{\pi n}{L}x$$

Множитель A находим из **условия нормировки** $\int_{-\infty}^{\infty}|\psi_n|^2 dx = 1,$

$$A^2\int_0^L \sin^2\left(\frac{\pi n}{L}x\right)dx = A^2\frac{L}{2} = 1, \qquad A = \sqrt{\frac{2}{L}}$$



Таким образом, **собственные волновые функции стационарных состояний частицы массы *m* в одномерной потенциальной яме с непроницаемыми стенками имеют вид**

$$\Psi_n(x,t) = \psi_n(x)\cdot e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}, \quad \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{\pi n}{L}x, \quad E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}n^2$$

Функции $\psi_n(x)$ первых трех состояний изображены на рисунке, справа.

В каждом квантовом состоянии $\Psi_n(x,t)$ **энергия** E_n имеет **определенное значение**, в котором **волновая функция осциллирует внутри ямы** и **для заданного квантового числа** n **имеет** $(n-1)$ **узловых точек внутри ямы**, где **волновая функция обращается в нуль**, не считая точек на краях ямы .

2 Движение частицы в области прямоугольной потенциальной ступеньки.

Рассмотрим движение частицы в силовом поле, в котором потенциальная энергия $U(x)$ изменяется с координатой x так, как показано на рис.2. Частица, имеющая полную энергию E, движется вдоль оси x. В левой части рис.2 потенциальная энергия равна нулю, а в правой части – постоянное значение $U_0 > E$.

x_0 - точка поворота, где кинетическая энергия равна нулю. Классическая частица, достигнув этой точки, остановится и начнет двигаться в обратном направлении. Область $x > x_0$ для неё недоступна.

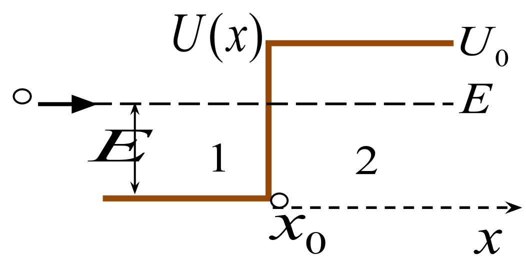


Рис.2. Потенциальная ступенька.

Решением уравнения Шредингера

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E - U(x)\right]\psi = 0$$

должна быть ***непрерывная функция*** , имеющая ***непрерывную первую производную***.

При значении разности $E - U(x_0) = 0$ производная $d\psi/dx = const$, и волновая функция не может сразу обратиться в нуль справа от x_0.

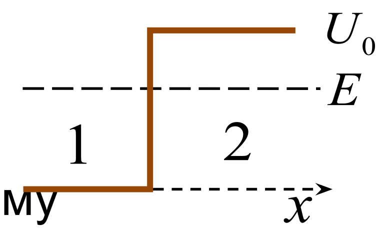
В соответствии с вероятностным смыслом волновой функции
это означает отличную от нуля вероятность обнаружить частицу
в области $x > x_0$.

Квантовая частица способна проникать в область, запрещенную классической механикой.

Будем искать решение уравнения Шредингера в областях 1 и 2.

В области 1 ($x < 0$), уравнение Шредингера принимает вид

$\psi'' + k_1^2\psi = 0$, где $k_1^2 = 2mE/\hbar^2$, два штриха над волновой функцией означают двойную производную по координате .



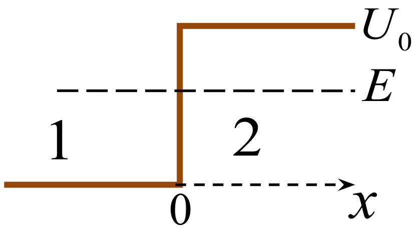
Общее решение этого уравнения представляет сумму двух волн: **падающую с амплитудой *A*** и **отраженную от потенциальной ступеньки волну с амплитудой *B*.**

$$\psi_1 = \psi_{1,пад} + \psi_{1,отр} = (Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}) \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

В области 2 $(x > 0)$, уравнение Шредингера $\psi'' - k_2^2\psi = 0$,

где $k_2^2 = 2m(U_0 - E)/\hbar^2$, имеет общее решение

$$\psi_2 = Ce^{-k_2 x} + De^{k_2 x}$$



Поскольку ψ_2 должна быть ограниченной, а второе слагаемое в решении неограниченно возрастает с увеличением x, то необходимо, чтобы $D = 0$. Таким образом физически приемлемым решением является

$$\psi_2 = Ce^{-k_2 x}$$

На границе раздела областей 1 и 2, то есть при $x = 0$, должны выполняться

условия непрерывности пси-функций и их производных:

$$\left.\begin{aligned}\psi_1(0) &= \psi_2(0)\\ \psi_1'(0) &= \psi_2'(0)\end{aligned}\right\} \Rightarrow \left\{\begin{aligned} A + B &= C\\ ik_1A - ik_1B &= -k_2C\end{aligned}\right.$$

Граничные условия позволяют выразить коэффициенты *B* и *C* через амплитуду *A* падающей волны.

В результате находим

$$\psi_1 = Ae^{ik_1x} + A\frac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2}e^{-ik_1x}$$

$$\psi_2 = A\frac{2k_1}{k_1 + ik_2}e^{-k_2x}$$

Коэффициент отражения *R* равен

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left|\frac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2}\right|^2 = 1$$

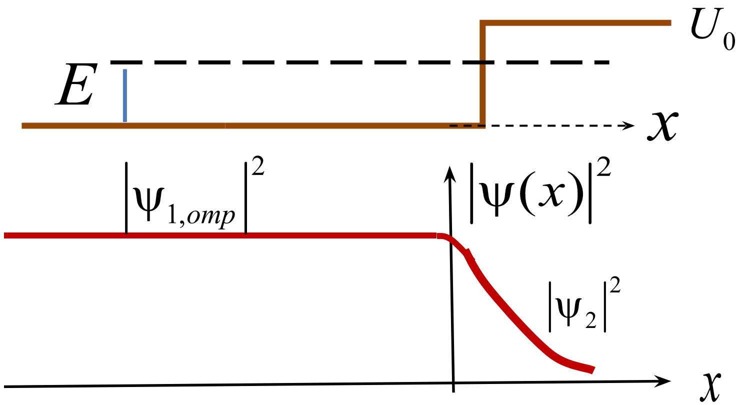


Рис.3. Зависимость плотности вероятности от координаты в случае потенциальной ступеньки, если $E < U_0$

На рис.3 представлена зависимость плотности вероятности обнаружения частицы от координаты *x* *для* ***отраженной*** *и* ***прошедшей*** *волн.*

Коэффициент отражения определяет вероятность того, что частица
отразится от ступеньки.

$R = 1$ **означает**: в установившемся (стационарном) состоянии **вся энергия падающей волны отражается, однако в классически запрещенной области существует определенная вероятность обнаружить там частицу. И эта вероятность равна**

$$W_{(x>0)} = \int_0^\infty |\psi_2|^2 dx = A^2 \frac{4k_1^2}{k_1^2 + k_2^2} \int_0^\infty e^{-2k_2 x} dx = A^2 \frac{2k_1^2}{k_2(k_1^2 + k_2^2)}$$

На глубине $x_{эфф} = \dfrac{1}{2k_2} = \dfrac{\hbar}{2\sqrt{2m(U_0 - E)}}$

плотность вероятности $|\psi_2|^2$ **уменьшается в** $e = 2,72$ **раза. Величина** $x_{эфф}$ **называется *эффективной глубиной проникновения* квантовой частицы в область, запрещенную классической механикой.**

Прохождение частицы массы m над барьером, когда $E > U_0$

С точки зрения классической механики ни одна частица в этом случае не будет отражаться от скачка потенциальной энергии в точке *x* = 0.

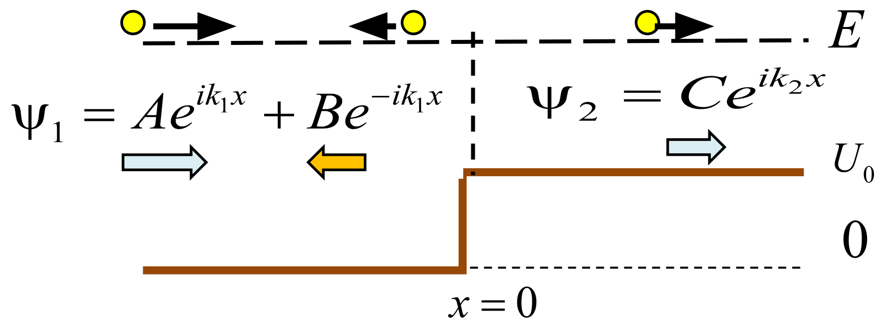


Рис.4.Энергия E *частицы больше высоты* U_0 *потенциальной ступеньки.*

Решение уравнения Шредингера $\psi'' + (2m/\hbar^2)(E - U_0)\psi = 0$

аналогично предыдущему случаю, и мы получаем:

$$x < 0 \Rightarrow \psi'' + k_1^2\psi = 0\,, \quad k_1^2 = 2mE/\hbar^2\,, \quad \psi_1 = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$

$$x > 0 \Rightarrow \psi'' + k_2^2\psi = 0\,, \; k_2^2 = (2m/\hbar^2)(E - U_0)\,, \; \psi_2 = Ce^{ik_2x}$$

Из граничных условий о непрерывности функций и их производных при $x = 0$ находятся амплитуды *B* и *C*:

$$B = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} A \quad , \qquad C = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} A$$

По аналогии с плотностью потока частиц $j_N = n\mathrm{v}$, где v — скорость частиц, n — плотность частиц (число частиц в единице объема), введем плотность потока вероятности

$j_W = \rho_W \mathrm{v} = |\psi|^2 \mathrm{v}$, где Λ — скорость одной частицы.

Коэффициенты отражения R и прохождения D определяются как :

$$R = \frac{j_{отр}}{j_{пад}} = \frac{|\psi_{отр}|^2 \upsilon_1}{|\psi_{пад}|^2 \upsilon_1} = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2 , \qquad D = \frac{j_{прош}}{j_{пад}} = \frac{|\psi_2|^2 \upsilon_2}{|\psi_{пад}|^2 \upsilon_1} = \frac{|C|^2 k_2}{|A|^2 k_1} = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}$$

Здесь использовалось соотношение $\mathrm{v} = p/m = \hbar k/m$. Можно убедиться, что $R + D = 1$.

Таким образом, **существует отличная от нуля вероятность отражения**, даже если $E > U_0$. **Этот эффект является чисто квантовым и объясняется наличием у частицы волновых свойств.**

Интересно отметить, что коэффициенты R и D не изменятся, если k_1 и k_2 поменять местами, что соответствует случаю, когда частица движется к потенциальной ступеньке справа налево.

3 Прямоугольный потенциальный барьер. Туннельный эффект.

Прямоугольный потенциальный барьер показан
на рис.5. Запишем уравнения Шредингера
в различных областях 1, 2, 3:

Область 1 и 3:

$$\psi''_{1,3} + k_1^2 \psi_{1,3} = 0 \qquad k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E \, ,$$

Область 2:

$$\psi''_2 - k_2^2 \psi_2 = 0 \qquad k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E) \, .$$

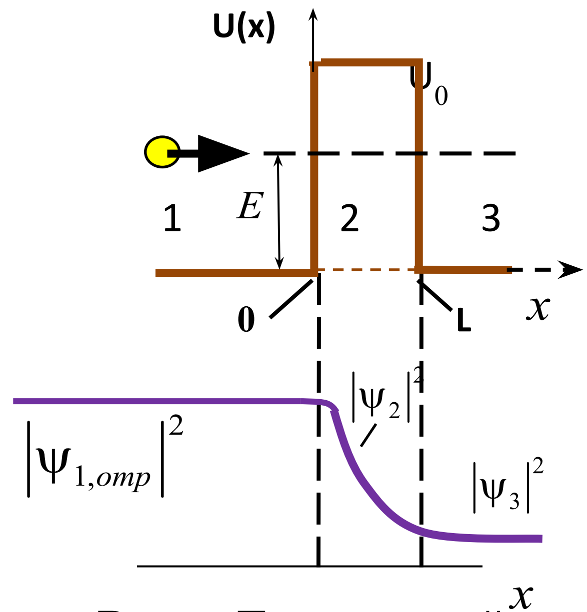


Рис.5. Туннельный эффект в случае прямоугольного барьера.

Решения этих уравнений имеют вид

$$\psi_1 = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x} \; ; \quad \psi_3 = C e^{ik_1 x} \; ;$$

$$\psi_2 = A_2 e^{k_2 x} + B_2 e^{-k_2 x}$$

Пусть частица движется к барьеру слева.
Она имеет определенную вероятность отразиться от барьера и некоторую вероятность «просочиться» через него. В области 3 имеется решение ψ_3. **«Просачивание» частиц «сквозь» потенциальный барьер называется *туннельным эффектом.***

Вероятность проникновения частицы в область 3 определяется ***коэффициентом прозрачности барьера*** $D = |C|^2 / |A_1|^2$

В том случае, когда $k_2 L >> 1$ (для электрона это условие выполняется уже при ширине барьера в несколько атомных слоев), коэффициент прозрачности равен

$$D \approx \frac{16 k_1^2 k_2^2}{(k_1^2 + k_2^2)} e^{2k_2 L}$$

или

$$D \approx 16 \frac{E}{U_0} \left(1 - \frac{E}{U_0}\right) \cdot \exp\left[-\frac{2L}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} \right]$$

Основной вклад в зависимость D от параметров задачи дает экспонента. Множитель перед экспонентой является медленно изменяющейся функцией отношения E/U_0, численное значение которой сравнимо с единицей. Поэтому часто при оценке коэффициента прозрачности используется выражение

$$D \approx \exp\left[-\frac{2L}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} \right]$$

4 Частица в прямоугольной потенциальной яме конечной глубины.

На рис.7. показаны две потенциальные ямы конечной глубины и схемы уровней энергии, которых всего три. Начало отсчета энергии выбрано не на дне, а сверху ямы. Каждому уровню энергии соответствует связанное стационарное состояние, для которого $E_n < 0$. Справа от каждой ямы показаны волновые функции трех связанных состояний частицы.

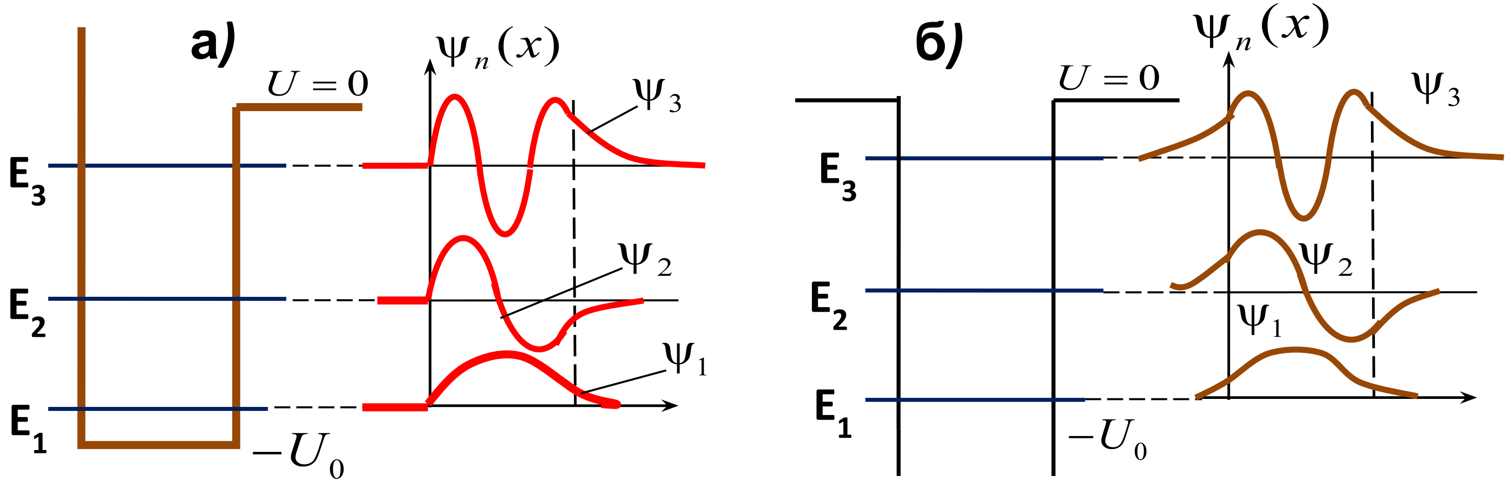


Рис.7. ***Потенциальные ямы конечной глубины.***

$$x_{эфф} = \frac{1}{2k_2} = \frac{\hbar}{2\sqrt{2m(U_0 - E)}}$$

В яме на рис.7,*а* потенциальная энергия на левой стенке стремится к бесконечности, поэтому волновые функции на этой стенке обращаются в нуль. Вне ямы (слева) $\psi = 0$. Волновая функция остается непрерывной, но перестает быть гладкой. Разрыв первой производной функции на левой стенке ямы обусловлен предельным переходом $U \to \infty$, что не реализуется в конкретных физических ситуациях.

На правой стенке для частицы в состояниях с энергиями E_n имеется потенциальный барьер конечной высоты, и частица с некоторой вероятностью проникает в классически запрещенную область под барьером. Это обусловлено тем, что волновая функция должна быть непрерывной и гладкой, она не может «оборваться» на правой стенке и должна продолжаться под $x_{эфф}$ барьер. Глубина проникновения под барьер увеличивается с уменьшением массы m частицы и разности $(U_0 - |E_n|)$.

Аналогично объясняется и вид волновых функций в случае ямы на рис.7, *б*. Заметим, что функция ψ_1 имеет один экстремум и ни одного нуля, функция ψ_2 имеет два экстремума и один нуль внутри ямы, следующая функция – три экстремума и два нуля, и т.д.

В потенциальной яме с двумя бесконечно высокими (непроницаемыми) стенками число состояний частицы (число уровней энергии) бесконечно велико. В яме конечной глубины число уровней энергии в яме ограничено и зависит от ширины ямы L и глубины U_0.

5 Когда в яме существует только одно стационарное состояние?

Выясним, когда в яме может существовать только одно связанное состояние (рис.8), и оно является основным. Для этого воспользуемся соотношением неопределенностей $\Delta p \cdot \Delta x \geq \hbar$

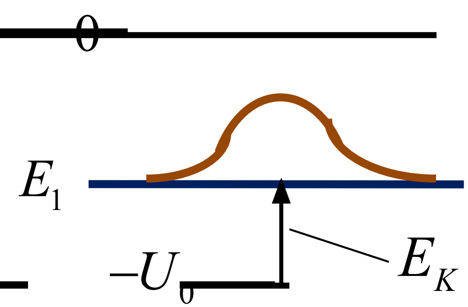


Рис.8. Потенциальная яма с одним уровнем энергии.

Полагая, что $\Delta x \approx L$, где L – ширина ямы, неопределенность в импульсе $\Delta p \approx p$, для кинетической энергии частицы в яме получим $E_K = p^2/2m \approx \hbar^2/2mL^2$.

Чтобы частица могла локализоваться внутри ямы, необходимо выполнение неравенства $E_K < U_0$, или $U_0 L^2 > \dfrac{\hbar^2}{2m}$

Полученное условие является приближенным. Строгое решение задачи о потенциальной яме на рис.7,*б* с использованием уравнения Шредингера приводит к неравенству $U_0 L^2 > \pi^2\hbar^2/2m$

Если потенциальная яма слишком узкая или слишком мелкая, в ней отсутствуют связанные состояния. С увеличением произведения $U_0 L^2$ появляется сначала один уровень энергии, затем второй, третий и так далее.

6 Выводы:

1. Энергия частицы *E* в потенциальной яме не может принимать произвольных значений, она принимает ряд дискретных значений, если выполнено условие $U_0 L^2 > \pi^2 \hbar^2 / 2m$. Квантовая частица не может упасть на дно ямы. Наименьшее значение называется ***энергией нулевых колебаний.***

2. **Для одномерного движения волновая функция ψ_{n+1} обращается в нуль внутри ямы *n* раз.**

3. **Если стенки ямы глубиной U_0 имеют конечную толщину, то частица может покинуть яму в результате туннельного эффекта.**

7

Квантовый гармонический осциллятор.

Гармонический осциллятор – это система, способная совершать гармонические колебания. **Малые колебания** вблизи положения равновесия можно считать **гармоническими**.
Примером таких колебаний в квантовой механике являются колебания атомов в молекулах, твердых телах и т.д.

Гармонические колебания частицы под действием возвращающей квазиупругой силы $F = -\beta x$

в классической физике описывается уравнением

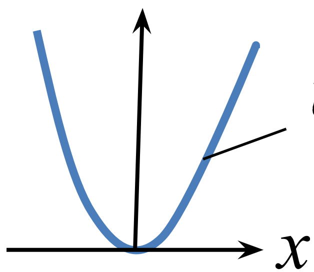
$m_0 \ddot{x} = -\beta x$, или $\ddot{x} + \omega^2 x = 0$, где $\omega^2 = \beta / m_0$.

Здесь ω – частота гармонических колебаний, m_0 - масса частицы.

Потенциальная энергия такого осциллятора равна

$$U(x) = \frac{\beta x^2}{2} = \frac{m_0 \omega^2}{2} x^2$$

Квантово-механическая задача о гармоническом осцилляторе **сводится к задаче о движении частицы в параболической потенциальной яме и решению стационарного уравнения Шредингера**



$$U(x) = \frac{m_0 \omega^2 x^2}{2}$$

$$\boxed{\psi'' + \frac{2m_0}{\hbar^2}\left(E - \frac{m_0 \omega^2 x^2}{2}\right)\psi = 0}$$

Решение этой задачи приводит к квантованию энергии в виде

$$E_n = \hbar\omega(n + 1/2) \qquad n = 0, 1, 2, 3, \cdots$$

Число n называется ***колебательным квантовым числом.***

Не приводя математического решения задачи, рассмотрим вид волновых функций из общих соображений. Пусть частица обладает полной энергией E_n. Точки a_0 и $-a_0$, в которых полная энергия $E_n = U(x) = m_0\omega^2 x^2/2$, являются для частицы классическими точками поворота. Подставляя в это равенство $x = \pm a_0$, получим, что $a_0 = \sqrt{2E_n/m_0\omega^2}$

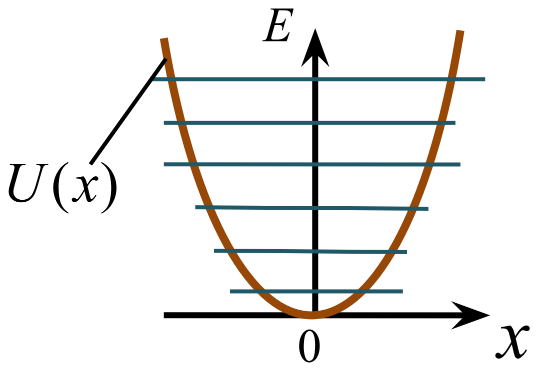
В основном состоянии с минимальной энергией $E_0 = \hbar\omega/2$, $n = 0$ (как и в основном состоянии в прямоугольной потенциальной яме с шириной $2a_0$) волновая функция $\psi_0(x)$ имеет экстремум в центре ямы $(x = 0)$ и нигде не обращается в нуль. Эта функция простирается за пределы точек поворота $a_0 = \pm\sqrt{2E_0/m_0\omega^2}$ так, что обеспечивается непрерывность самой функции и её первой производной при $x = \pm a_0$. Непосредственной подстановкой в уравнение Шредингера можно убедиться, что функция

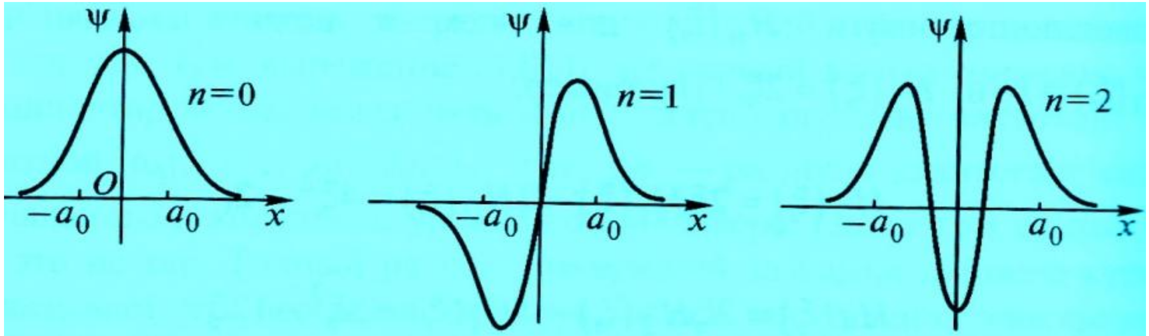
$$\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{x_0\sqrt{\pi}}}\exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right)$$

где $x_0 = \sqrt{\hbar/m_0\omega}$, является его решением для $E = E_0 = \hbar\omega/2$.

Если $x \to \infty$, то $\psi_0(x) \to 0$.

Волновая функция основного состояния $(n = 0)$ приведена на рис. 9,*а*.





а) б) в)

Рис.9.Уровни энергии осциллятора и волновые функции первых трех состояний осциллятора

В первом возбужденном состоянии $(n = 1)$ волновая функция $\psi_1(x)$, как и функция в прямоугольной яме с шириной $2a_0$, должна иметь два экстремума и один нуль в центре ямы. Из решения уравнения Шредингера следует, что

$$\psi_1(x) = A_1 \cdot x \cdot \exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right)$$

Эта функция приведена на рис.9,*б*. Аналогично, в следующем состоянии волновая функция должна иметь три экстремума и два нуля (рис.9,*в*) и т. д.

Из приведенного рассмотрения следует:

1. Квантовая механика не интересуется устройством осциллятора. Общие принципы должны быть применимы для всех частиц

с массой m_0 и всех возможных осцилляторов.

Можно ввести обобщенную координату q отклонения осциллятора из положения равновесия и

обобщенный импульс $p = m_0\dot{q}$.

Тогда энергия осциллятора запишется в виде

$$E = \frac{p^2}{2m_0} + \frac{m_0\omega^2 q^2}{2}$$

2. Энергия осциллятора изменяется не непрерывно, а порциями величины $\hbar\omega$. Тем самым подтверждена гипотеза М.Планка,

с которой началось зарождение квантовой физики.

3. Когда энергия минимальна, классический осциллятор находится в покое в положении равновесия.

Квантовый осциллятор в состоянии с минимальной энергией

при $x = 0$ **совершает колебания –** **«нулевые колебания».**

Среднее значение координаты $\langle q \rangle = 0$ **и импульса** $\langle p \rangle = 0$**, а среднее значение квадрата координаты** $\langle q^2 \rangle \neq 0$ **и квадрата импульса** $\langle p^2 \rangle \neq 0$**.**

Энергия колебаний равна $\hbar\omega/2$**. Кинетическая и потенциальная энергии не могут одновременно равняться нулю, это противоречило бы соотношениям неопределенностей.**

4. Представим себе, что между параллельными металлическими экранами, перпендикулярно им, образовалась **электромагнитная стоячая волна**. В такой волне происходят колебания электрического и магнитного поля – **это тоже осциллятор**. **Обобщенной координатой** можно считать **напряженность электрического поля** в какой-либо точке.

В качестве импульса должна быть величина, пропорциональная скорости изменения электрического поля. Такой величиной является **магнитное поле.** **При выборе таких обобщенных величин энергия будет иметь такой же вид записи, как у осциллятора. К стоячей волне – осциллятору можно применить уже известные результаты квантования.**

8 Бегущие волны

Рассмотрим бегущую волну. В этом случае тоже происходят периодические колебания, и энергия для каждого волнового вектора $\vec{k}$ имеет такой же вид, как для осциллятора.

Энергия волны определяется соотношением $E_n = \hbar\omega(n+1/2)$ и изменяется порциями величины $\hbar\omega$, но в отличие от стоячей волны бегущая волна обладает импульсом . Поэтому, когда номер возбуждения бегущей волны с волновым вектором $\vec{k}$ $(k = 2\pi/\lambda)$ увеличивается на единицу $n(\to n+1)$, это означает появление частицы-фотона с энергией $E = \hbar\omega$ и импульсом $p = \hbar\omega/c$.

Каждому $\vec{k}$ соответствует свой осциллятор, который может находиться в определенном состоянии возбуждения.

9 Нулевые колебания

В основном состоянии, состоянии с минимальной энергией, происходят нулевые колебания. Можно найти вероятность того или иного значения электрического или магнитного поля. Средний квадрат напряженности электрического и средний квадрат напряженности магнитного полей имеют неравные нулю значения, даже если в пространстве нет ни одной частицы и ни одного фотона электромагнитного поля. **Фотоны возникают как возбужденные состояния этого поля.**

Существуют нулевые колебания в вакууме всех возможных физических полей в основном состоянии, колебания, состоящие в появлении и исчезновении электрон-позитронных, нуклон-антинуклонных и других пар. С этой точки зрения вакуум наполнен такими не родившимися, образующимися и исчезающими частицами. Они называются ***виртуальными частицами.*** Достаточно возбудить вакуум, сталкивая, например, два нуклона, виртуальные частицы могут превратиться в реальные – при столкновении рождаются новые частицы.