Тема 4.2 «КВАНТОВОМЕХАНИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ АТОМА»

Движение свободных частиц. Туннельный эффект.

Движение свободных частиц. Туннельный эффект.

1. Движение свободной частицы.
2. Частица в одномерной потенциальной яме с абсолютно непроницаемыми стенками. Квантование энергии.
3. Гармонический осциллятор в квантовой механике. Принцип соответствия.
4. Прохождение частицы через одномерный потенциальный барьер. Туннельный эффект. Коэффициент прозрачности.

1. Движение свободной частицы.

Свободная частица — частица, движущаяся в отсутствие внешних полей.

Так как на свободную частицу, движущуюся вдоль оси x, силы не действуют, то потенциальная энергия частицы U(x)=const и ее можно принять равной нулю. Тогда полная энергия частицы совпадает с ее кинетической энергией.

Тогда уравнение Шредингера для стационарных состояний:

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

примет вид:

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

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

Энергия свободной частицы может принимать любые значения:

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

Т.е.:

Энергетический спектр свободной частицы непрерывен.

Плотность вероятности не зависит ни от времени, ни от координат:

$$|\Psi|^2 = |\psi|^2 = |A|^2$$

Все положения свободной частицы в пространстве равновероятны.

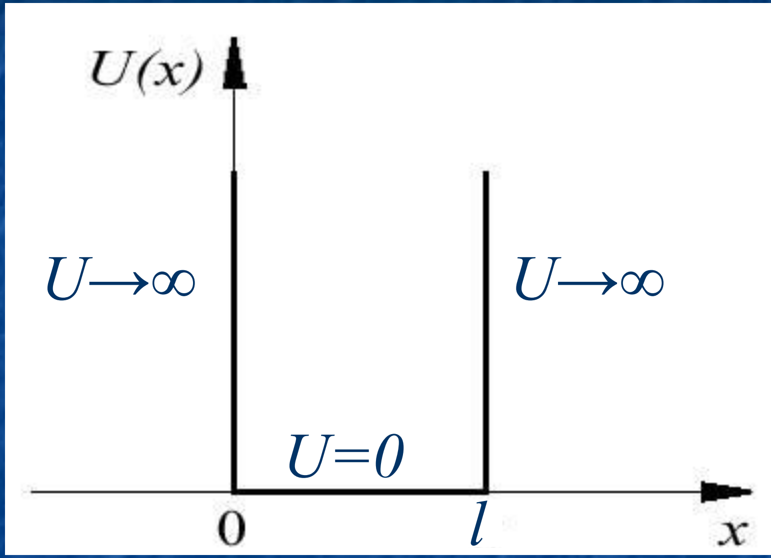
2. Частица в одномерной потенциальной яме с абсолютно непроницаемыми стенками. Квантование энергии.

Потенциальная яма – ограниченная область пространства с пониженной потенциальной энергией частицы.

l – ширина ямы, k – волновое число,

E – полная энергия частицы.

Потенциальная энергия частицы:



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

Стационарное уравнение Шредингера в пределах ямы ($0 < x < l$):

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

Граничные условия:

$$\boxed{\psi(0) = \psi(l) = 0}$$

Общее решение уравнения Шредингера:

$$\boxed{\begin{aligned} &\psi(x) = A\sin kx + B\cos kx \\ &B = 0 \\ &\psi(x) = A\sin kx \end{aligned}}$$

Условию

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

удовлетворяет:

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

$$(n = 1,2,3,\ldots)$$

Из условия нормировки:

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

$$A = \sqrt{\frac{2}{l}}$$

Собственные функции:

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

Нормированные собственные функции:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{n\pi x}{l}$$

$$(n = 1, 2, 3, \ldots)$$

Т.к.: $$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}; \quad k = \frac{n\pi}{l}$$

Собственные значения энергии частицы:

$$\boxed{E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} n^2 \quad (n = 1,2,3,...)}$$

Спектр энергий частицы в потенциальной яме дискретен.

Значения энергии «квантуются».

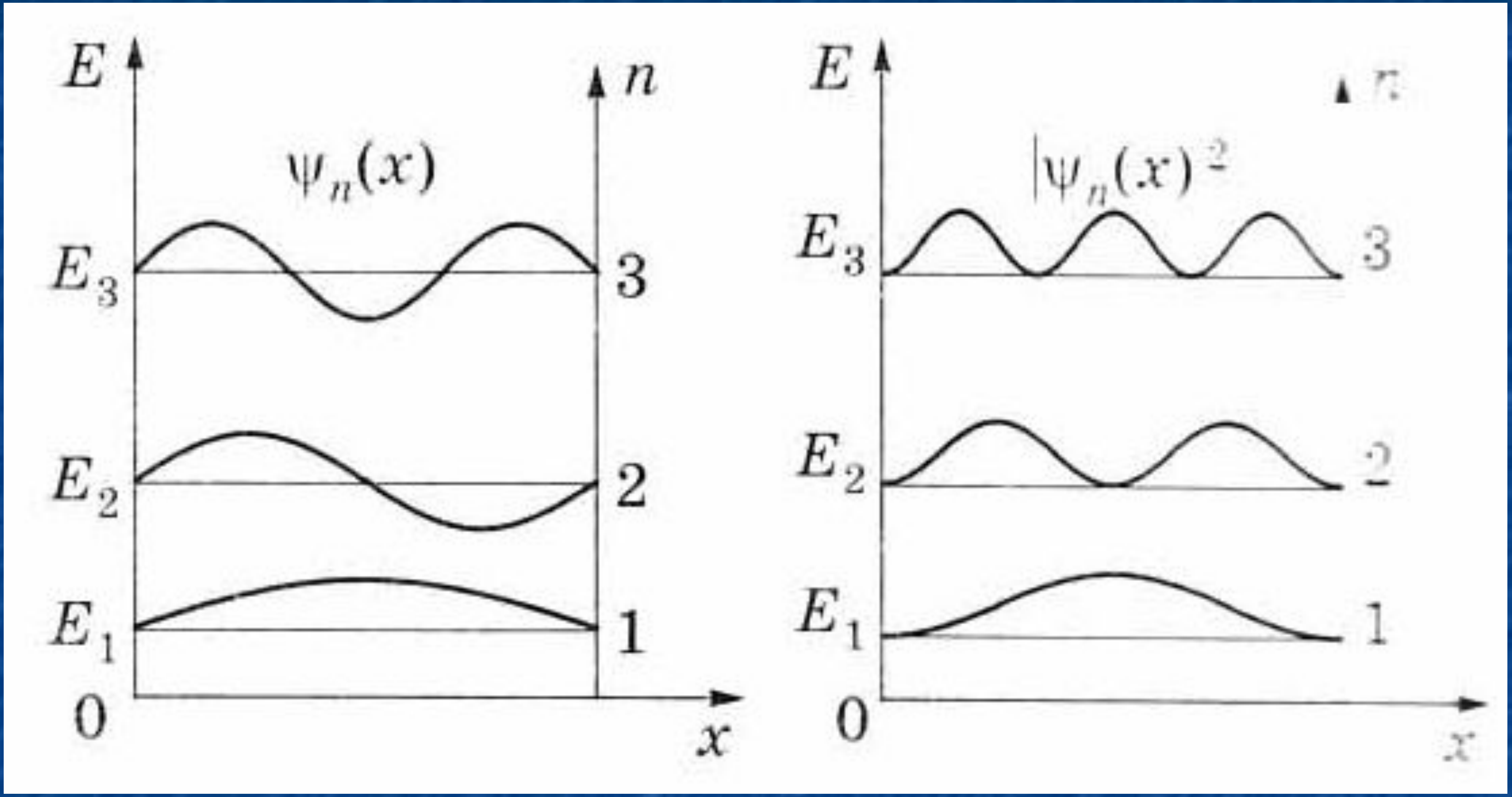
E_n – уровни энергии,

n – квантовое число.

Минимальная энергия (основное состояние) при n=1:

$$\boxed{E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2}}$$

Собственные функции и плотности вероятности обнаружения частицы на разных расстояниях от стенок ямы.



3. Гармонический осциллятор в квантовой механике.

Линейный (одномерный) гармонический осциллятор – система, совершающая одномерное движение под действием квазиупругой силы.

Потенциальная энергия линейного гармонического осциллятора:

$$\frac{m\omega_o^2 x^2}{2} = U$$

Уравнения Шредингера для линейного гармонического осциллятора в квантовой механике:

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

Собственные значения энергии гармонического осциллятора:

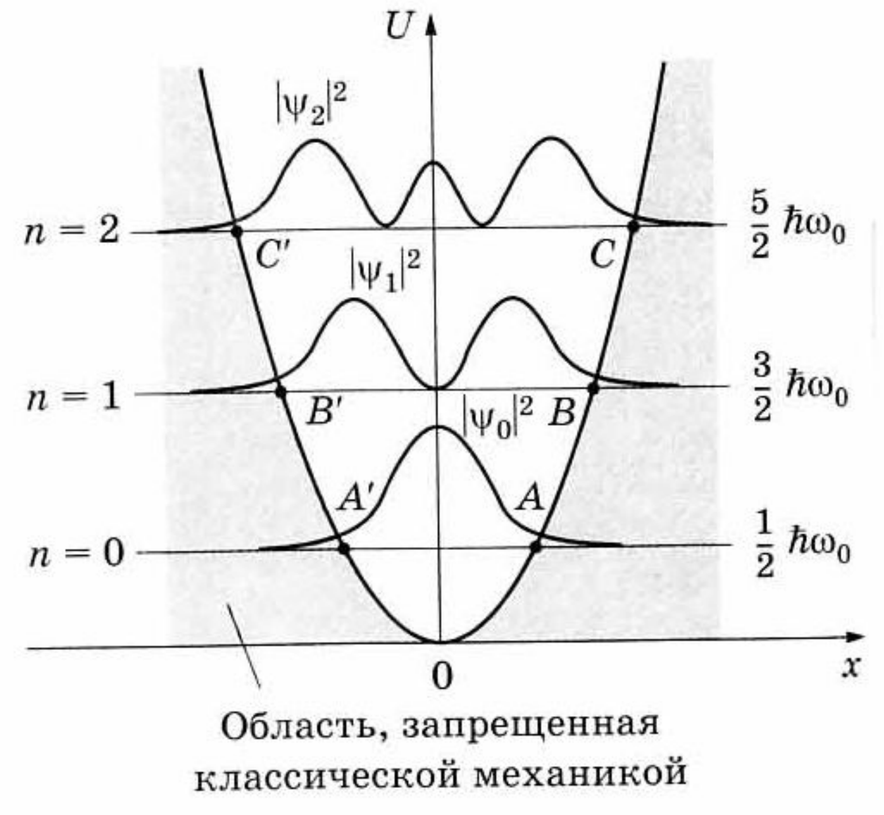
$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_o$$

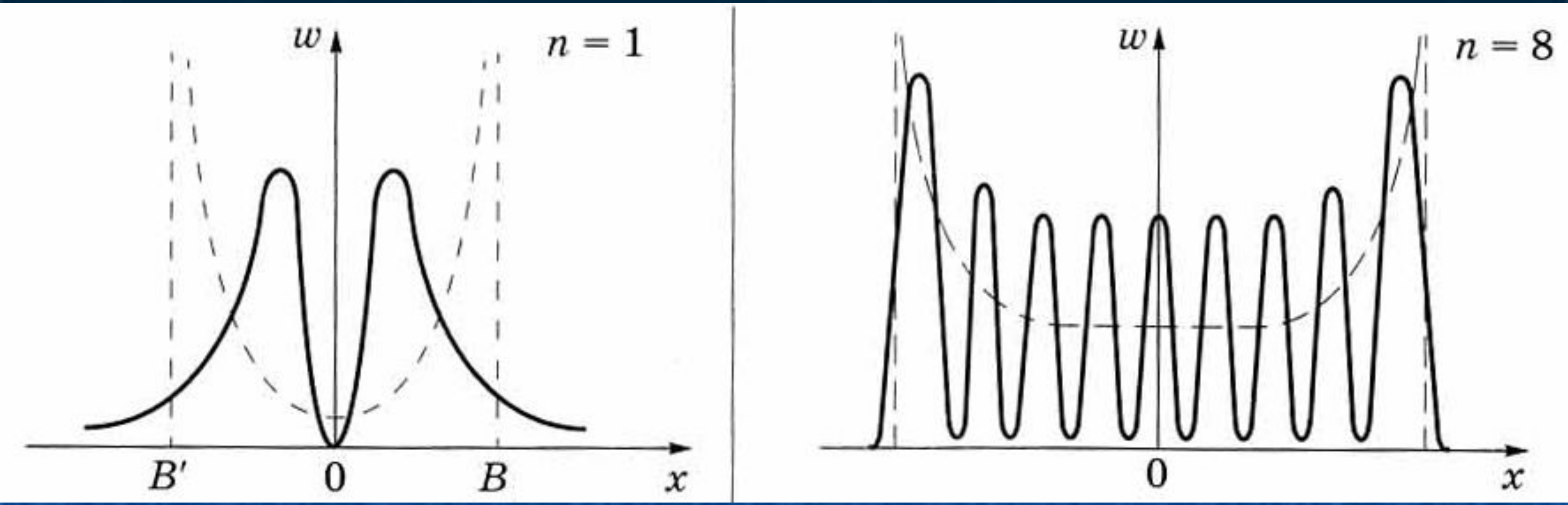
$$(n = 1,2,3,\ldots)$$

<u>Энергия нулевых колебаний гармонического осциллятора:</u>

$$E_o = \frac{\hbar\omega_o}{2}$$

Энергия нулевых колебаний гармонического осциллятора - следствие соотношения неопределенностей: частица не может находиться на дне потенциальной ямы независимо от ее формы.





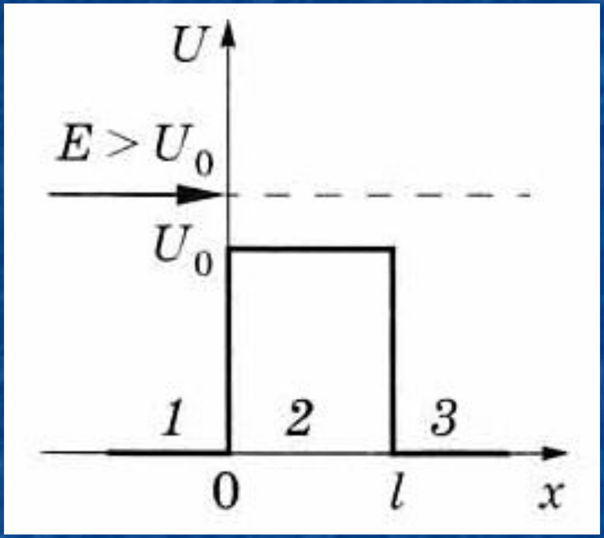
<u>Принцип соответствия Бора:</u>

Выводы и законы квантовой механики при больших значениях квантовых чисел должны соответствовать выводам и законам классической механики.

4. Прохождение частицы через одномерный потенциальный барьер. Туннельный эффект. Коэффициент прозрачности.

Потенциальная энергия частицы:

$$U(x)=\begin{cases} 0, x<0 \\ U_0, 0\le x\le l \\ 0, x>l \end{cases}$$



Для E>U_0 уравнение Шредингера для области 1 и 3:

$$\frac{\partial^2\psi_{1,3}}{\partial x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}E\psi_{1,3}=0,\quad k_{1,3}=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}=\frac{2\pi}{\lambda_{1,3}},\quad \frac{\partial^2\psi_{1,3}}{\partial x^2}+k_{1,3}^2\psi_{1,3}=0$$

для области 2:

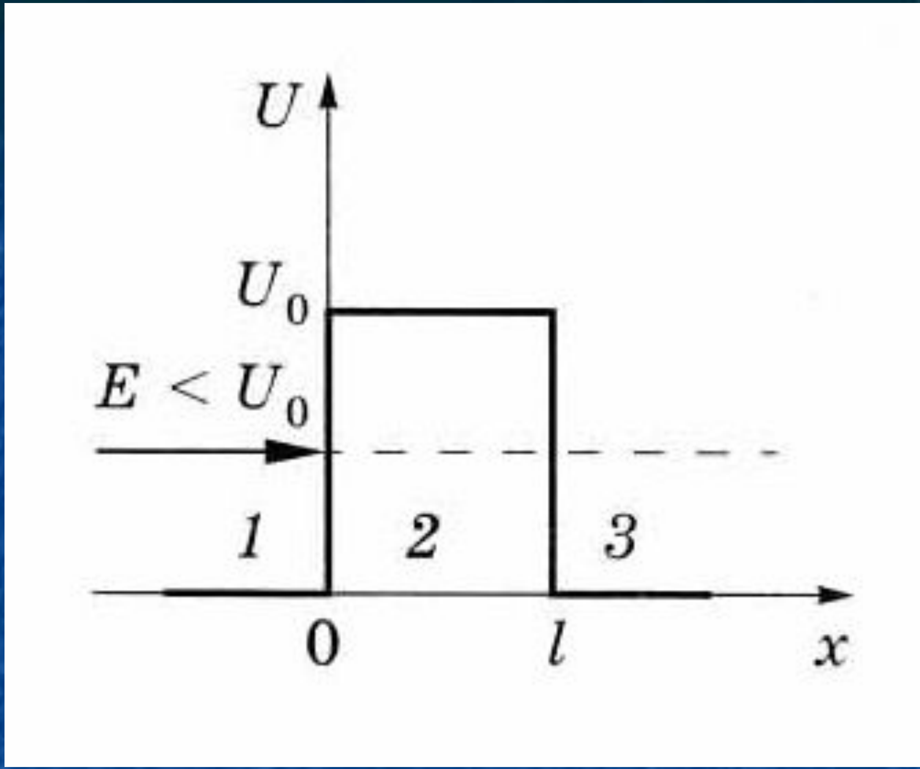
$$\frac{\partial^2\psi_2}{\partial x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-U_0)\psi_2=0,\quad k_2=\sqrt{\frac{2m(E-U_0)}{\hbar^2}}=\frac{2\pi}{\lambda_2},\quad \frac{\partial^2\psi_2}{\partial x^2}+k_2^2\psi_2=0$$

Общие решения уравнений Шредингера:

$$\psi_1(x) = A_1 e^{ik_{1,3}x} + B_1 e^{-ik_{1,3}x},$$
$$\psi_2(x) = A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x},$$
$$\psi_3(x) = A_3 e^{ik_{1,3}x}$$

При $E>U_0$ волна на границе 1 и 2 частично отражается и частично проходит в область 2, затем она опять на границе 2 и 3 частично отражается и частично проходит в область 3. В области 2 длина волны де Бройля больше, чем в областях 1 и 3

Для E<U$_0$:



уравнение Шредингера для области 1 и 3:

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

для области 2:

$$\frac{\partial^2 \psi_2}{\partial x^2} - \beta^2 \psi_2 = 0, \qquad \beta = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}}$$

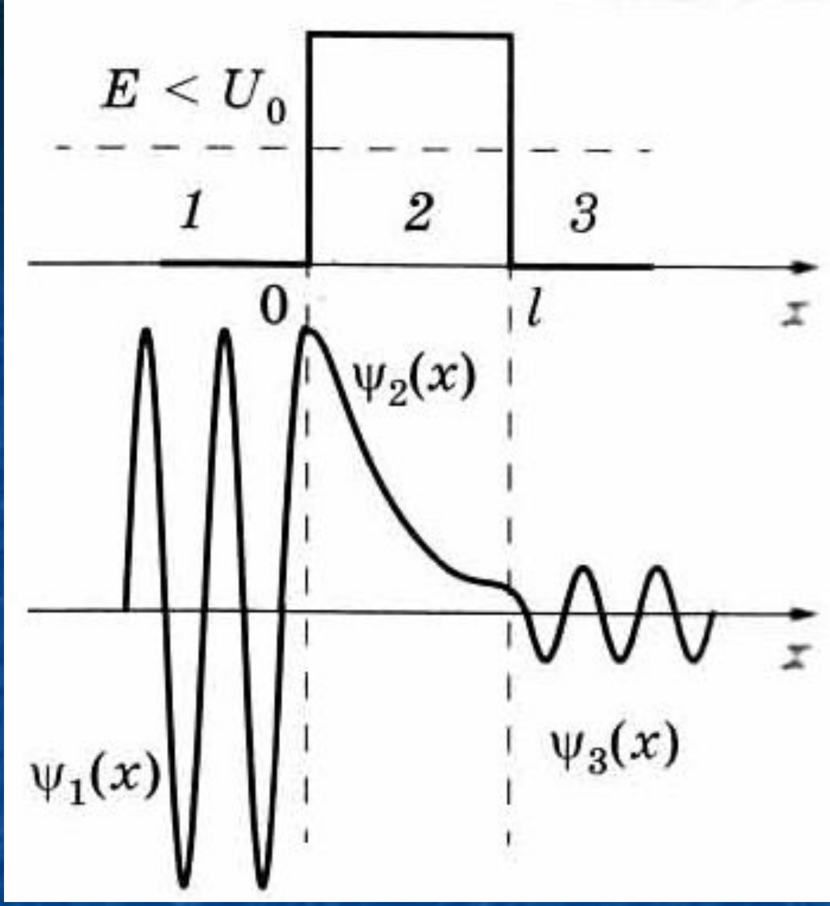
Общие решения уравнений Шредингера:

$$\psi_1(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx},$$
$$\psi_2(x) = A_2 e^{\beta x} + B_2 e^{-\beta x},$$
$$\psi_3(x) = A_3 e^{ikx}$$

При $E<U_0$ согласно квантовой механике, микрочастица может «пройти» сквозь потенциальный барьер. Это специфическое квантовое явление получило название туннельного эффекта.

Волновые функции:

$$\psi_1(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx},$$
$$\psi_2(x) = A_2 e^{-\beta x},$$
$$\psi_3(x) = A_3 e^{ikx}$$



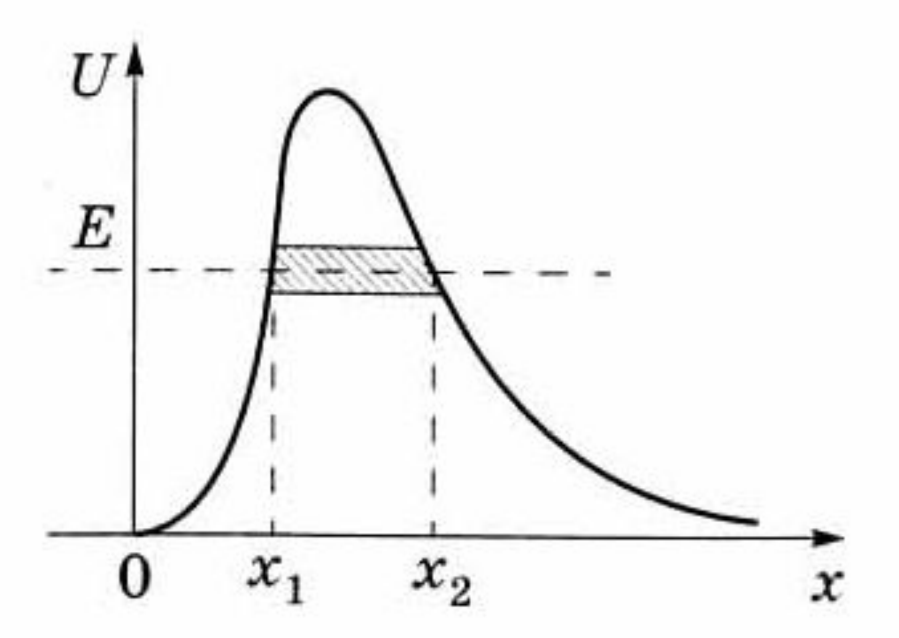
Туннельный эффект: частица имеет отличную от нуля вероятность прохождения сквозь потенциальный барьер конечной ширины .

Коэффициент прозрачности для прямоугольного барьера:

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - E)}\, l\right)$$

Коэффициент прозрачности для барьера произвольной формы:

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



Выводы:

При $E < U_0$ по классической теории частицы не смогут преодолеть потенциального барьера и отразятся от него; согласно квантовой теории, часть частиц отражается, а часть имеет отличную от нуля вероятность пройти сквозь потенциальный барьер.

При $E > U_0$, по классической теории все частицы преодолевают потенциальный барьер; согласно квантовой теории, часть частиц проходит, а часть отражается. Как подбарьерное прохождение, так и надбарьерное отражение являются специфическими квантовыми эффектами, связанными с волновыми свойствами частиц.