Тема: Элементы квантовой физики

1. Понятие о волновой функции

2. Уравнение Шредингера

3. Движение свободной частицы

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

6. Прохождение частиц сквозь потенциальный барьер. Туннельный эффект

x

1. Понятие о волновой функции

Экспериментальное подтверждение идеи де Бройля об универсальности корпускулярно-волнового дуализма, ограниченность применения классической механики к микрообъектам, диктуемая соотношением неопределенностей, а также противоречия ряда экспериментов с применяемыми в начале XX века теориями привели к ***новому этапу развития квантовой физики – созданию квантовой механики***, описывающей законы движения и взаимодействия микрочастиц с учетом их волновых свойств. Ее создание и развитие охватывает период с 1900 г. (формулировка Планком квантовой гипотезы) до 20-х годов XX века и связано, прежде всего, с работами австрийского физика Э. Шредингера, немецкого физика В. Гейзенберга и английского физика П. Дирака.

x

Необходимость вероятностного подхода к описанию микрочастиц, является важнейшей отличительной особенностью квантовой теории.

Можно ли волны де Бройля истолковывать как волны вероятности, т.е. считать, что вероятность обнаружить микрочастицу в различных точках пространства меняется по волновому закону?

Такое толкование волн де Бройля уже неверно, хотя бы потому, что тогда вероятность обнаружить частицу в некоторых точках пространства может быть отрицательна, что не имеет смысла.

x

Чтобы устранить эти трудности ***немецкий физик М. Борн в 1926 г. предположил, что по волновому закону меняется не сама вероятность, а величина, названная*** **амплитудой вероятности** *и обозначаемая*

Ψ(x, y, z, t).

Эту величину называют также ***волновой функцией*** (или Ψ – функцией).

Амплитуда вероятности может быть комплексной, и вероятность W пропорциональна квадрату ее модуля:

$$W \sim \left|\Psi(\tilde{o}, y, z, t)\right|^2,$$

где $|\Psi|^2 = \Psi\Psi`$ , где Ψ\` – функция комплексно-сопряженная с Ψ.

x

$$W \sim \left|\Psi(x, y, z, t)\right|^2,$$

Таким образом, ***описание микрообъекта с помощью волновой функции имеет статистический, вероятностный характер***:

квадрат модуля волновой функции ***(квадрат модуля амплитуды волн де Бройля) определяет*** **вероятность** ***нахождения частицы в момент времени в области с координатами x и dx, y и dy, z и dz.***

x

Итак, ***в квантовой механике состояние частицы описывается принципиально по-новому –***

с помощью волновой функции, которая является основным носителем информации об их корпускулярных и волновых свойствах.

Вероятность нахождения частицы в объеме V равна:

$$\mathrm{d}W = |\Psi|^2 \mathrm{d}V$$

x

Величина $|\Psi|^2 = dW/dV$ *(квадрат модуля* Ψ *– функции) имеет смысл* ***плотности вероятности****, т.е.* ***определяет вероятность нахождения частицы в единице объема*** *в окрестности точки, имеющей координаты* x, y, z*.*

Таким образом, ***физический смысл имеет не сама*** Ψ ***– функция, а квадрат ее модуля*** $|\Psi|^2$***, которым*** ***определяется интенсивность волн де Бройля.***

x

Вероятность найти частицу в момент времени t в конечном объеме V, согласно теореме о сложении вероятностей, ***равна***:

$$W = \int_{\upsilon} \mathrm{d}W = \int_{\upsilon} |\Psi|^2 \mathrm{d}V$$

Т.к. $|\Psi|^2 \mathrm{d}V$ определяется как вероятность, то необходимо волновую функцию Ψ представить так, чтобы вероятность достоверного события ***обращалась в единицу***, если за объем V принять бесконечный объем всего пространства.

Это означает, что при данном условии частица должна находиться где-то в пространстве.

Условия нормировки вероятностей: $\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 \mathrm{d}V = 1$

x

Условия нормировки вероятностей:

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} |\,\Psi\,|^2\, \mathrm{d}V = 1,$$

где данный интеграл вычисляется ***по всему бесконечному пространству***, т.е. по координатам x, y, z ***от –∞ до ∞.***

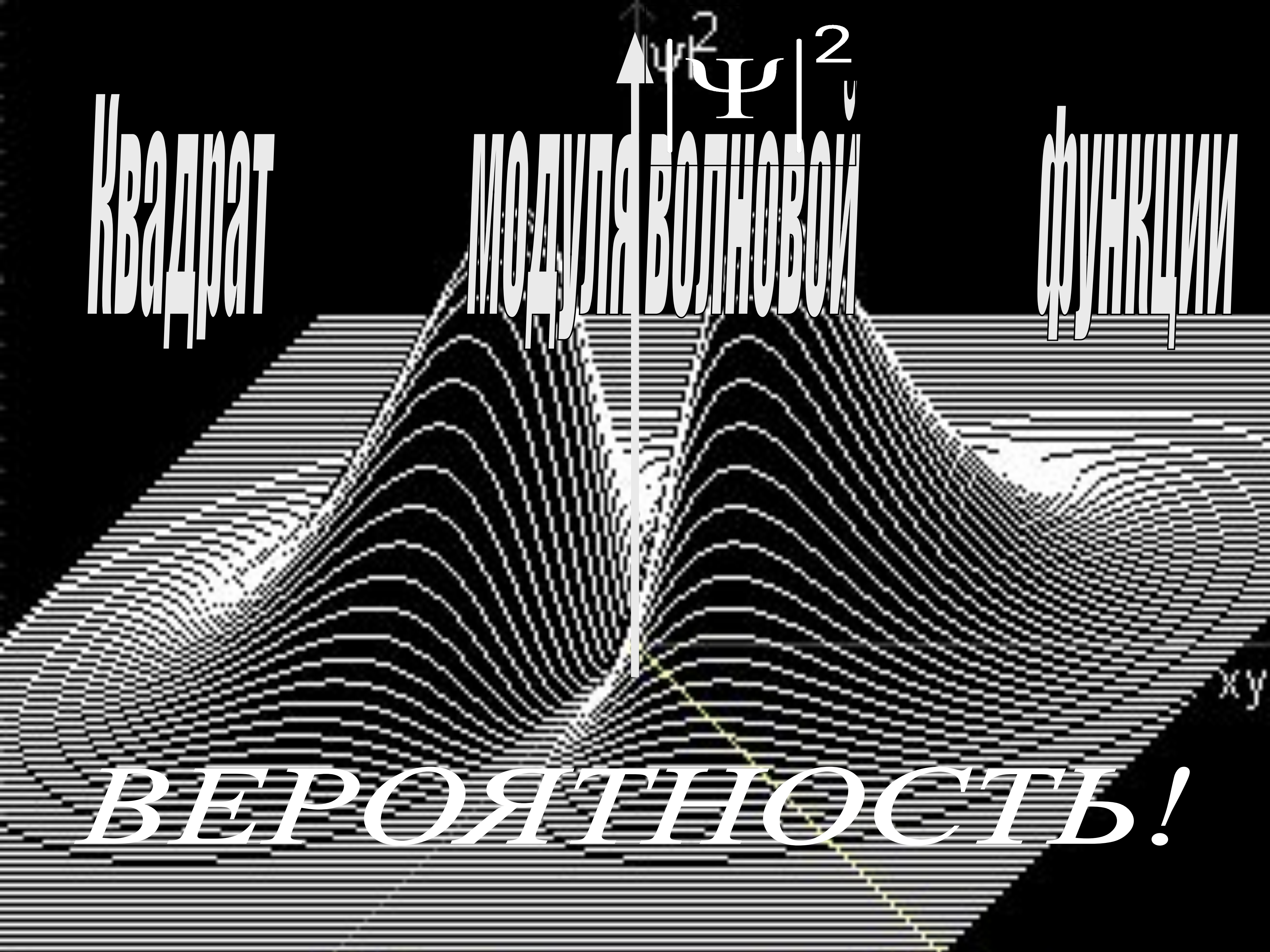
Таким образом, ***условие нормировки говорит об объективном существовании частицы во времени и пространстве.***

Условие нормировки волновой функции:

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

$$|\Psi|^2$$

определяет вероятность нахождения электрона в данной точке пространства


Квадрат модуля волновой функции
$|\Psi|^2$
ВЕРОЯТНОСТЬ!

x

Чтобы волновая функция являлась объективной характеристикой состояния микрочастицы, ***она должна удовлетворять ряду ограничительных условий***.

Функция Ψ, характеризующая вероятность обнаружить действия микрочастицы в элементе объема, ***должна быть***:

- ***конечной*** (вероятность не может быть больше единицы);
- ***однозначной*** (вероятность не может быть неоднозначной величиной);
- ***непрерывной*** (вероятность не может меняться скачком).

x

Волновая функция удовлетворяет принципу суперпозиции: ***если система может находиться в различных состояниях, описываемых волновыми функциями Ψ_1, Ψ_2, … Ψ_n, то она может находиться в состоянии, описываемом линейной комбинацией этих функций***

$$\Psi = \sum_n C_n \Psi_n$$

где C_n ($n = 1, 2, 3\ldots$) – произвольные, комплексные числа.

x

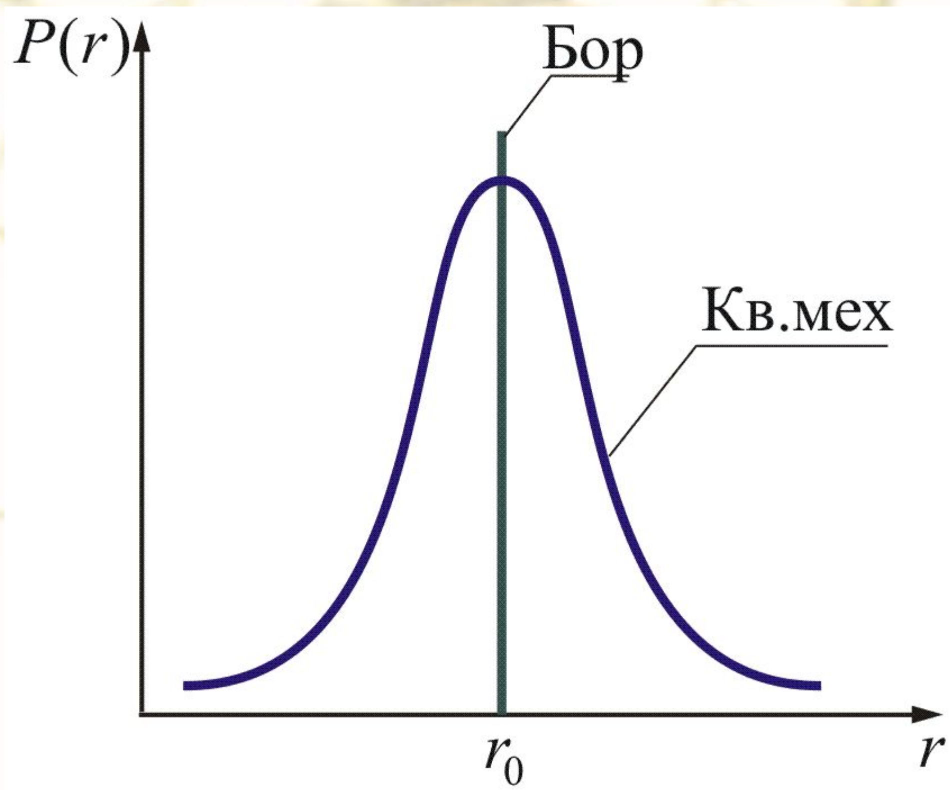
Сложение волновых функций (амплитуд вероятностей определяемых квадратами модулей волновых функций) ***принципиально отличает квантовую теорию от классической статической теории***, в которой для независимых событий справедлива теорема сложения вероятностей.

x

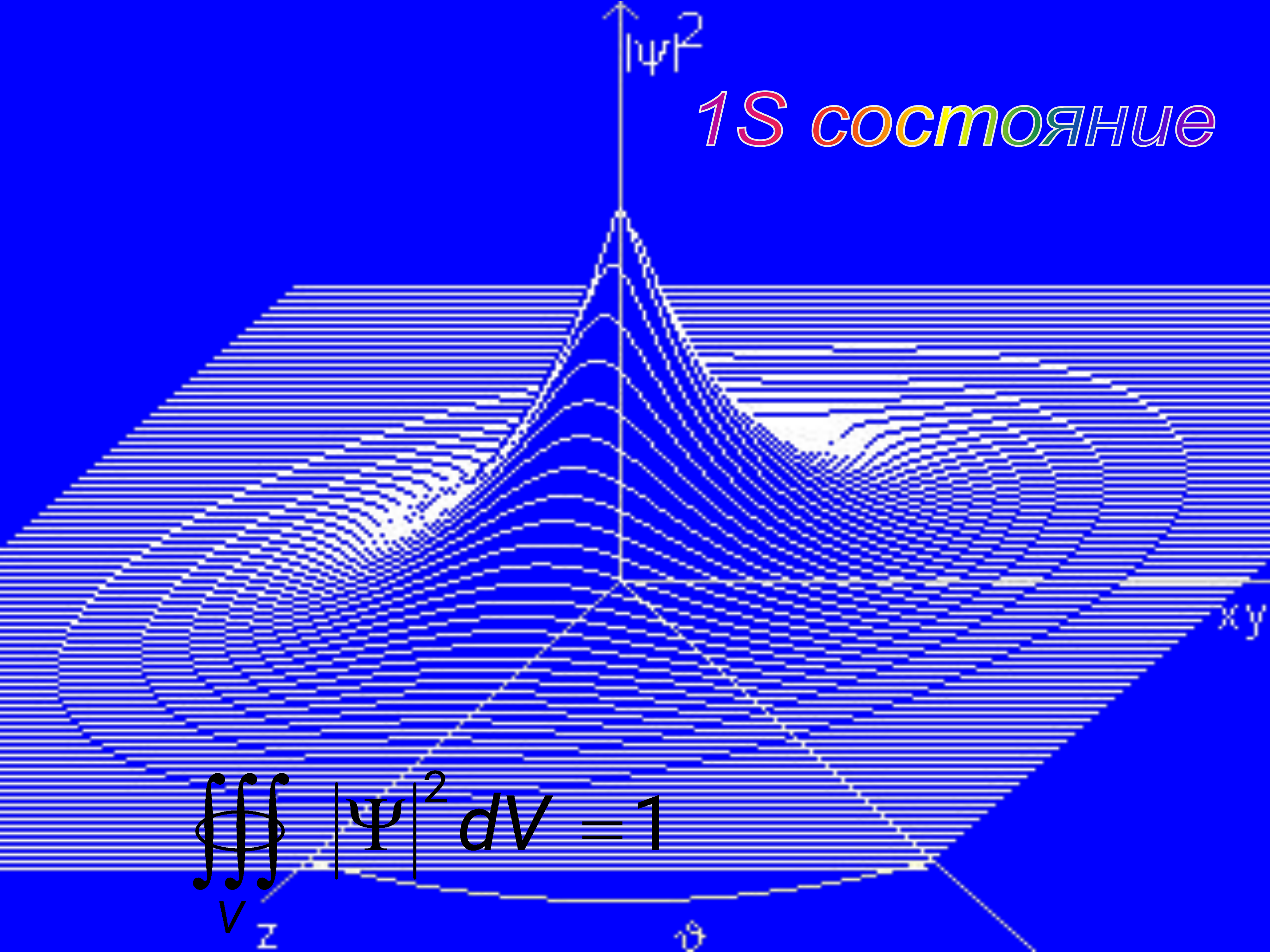
***Волновая функция Ψ является основной характеристикой состояния микрообъектов*.**

Например, среднее расстояние $<r>$ электрона от ядра вычисляется по формуле

$$< r >= \int_{-\infty} r|\Psi|^2 \mathrm{d}V$$



1S состояние



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

x

2. Уравнение Шредингера

Толкование волн де Бройля и соотношение неопределенностей Гейзенберга привели к выводу, что уравнением движения в квантовой механике, описывающей движение микрочастиц в различных силовых полях, ***должно быть уравнение, из которого бы вытекали наблюдаемые на опыте волновые свойства частиц.***

x

Основное уравнение должно быть уравнением относительно волновой функции $\Psi(x, y, z, t)$, т.к. именно величина $|\Psi|^2$, осуществляет вероятность пребывания частицы в момент времени t в объеме $\mathrm{d}V$, т.е. в области с координатами x и $x+\mathrm{d}x$, y, и $y+\mathrm{d}y$, z и $z+\mathrm{d}z$.

Т.к. искомое уравнение должно учитывать волновые свойства частиц, то оно должно быть волновым уравнением, подобно уравнению, описывающему электромагнитные волны.

Основное уравнение нерелятивистской квантовой механики сформулировано в 1926 г. Э. Шредингером.

Шредингер Эрвин (1887 – 1961) – австрийский физик-теоретик, один из создателей квантовой механики. Основные работы в области статистической физики, квантовой теории, квантовой механики, общей теории относительности, биофизики.

Разработал теорию движения микрочастиц – волновую механику, построил квантовую теорию возмущений – приближенный метод в квантовой механике. За создание волновой механики удостоен Нобелевской премии.

x

Уравнение Шредингера не выводится, а ***постулируется.***

Правильность этого уравнения подтверждается согласием с опытом получаемых с его помощью результатов, что в свою очередь, придает ему характер ***закона природы***.

x

Уравнение Шредингера ***в общем виде*** записывается так:

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + U(x,y,z,t)\Psi = i\hbar\frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2},}$$

где $\hbar = \dfrac{h}{2\pi}$ - постоянная Планка,

∇^2– оператор Лапласа $\left(\nabla^2\Psi = \dfrac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \dfrac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} + \dfrac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}\right)$,

i – мнимая единица,

$U(x,\ y,\ z,\ t)$ – потенциальная функция частицы в силовом поле, в котором она движется,

Ψ – искомая волновая функция.

m – масса частицы.

x

Если силовое поле, в котором движется частица потенциально, то ***функция U не зависит явно от времени*** и имеет смысл **потенциальной энергии.**

В этом случае решение уравнения Шредингера распадается на два сомножителя, один из которых зависит только от координаты, а другой – только от времени.

$$\Psi(x, y, z, t) = \Psi(x, y, z) e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

Здесь E – полная энергия частицы, которая в случае стационарного поля остается постоянной.

Уравнение Шредингера для стационарных состояний

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

E - полная энергия электрона

U - потенциальная энергия

-волновая функция электрона

x

Уравнение Шредингера для стационарных состояний

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

можно переписать в виде:

$$\boxed{\hat{H}\Psi = E\Psi}$$

$-\dfrac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U = \hat{H}$ – оператор Гамильтона, равный сумме операторов

Гамильтониан является оператором энергии E.

x

В квантовой механике и другим динамическим переменным сопоставляются ***операторы***.

Соответственно рассматривают ***операторы координат, импульса, момента импульса*** и т.д.

Эрвин Шрёдингер (1887-1961)

Любое движение

микрочастиц можно

уподобить движению

особых волн

Для стационарных

Состояний при движении по одной оси x

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

x

3. 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*

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

x

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\Psi = 0 \qquad (1)$$

Прямой подстановкой можно убедиться в том, что частным *решением уравнения* (1) является функция

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

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

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

x

Из выражения (2) следует, что *зависимость энергии от импульса* оказывается *обычной для нерелятивистских частиц:*

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

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

x

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

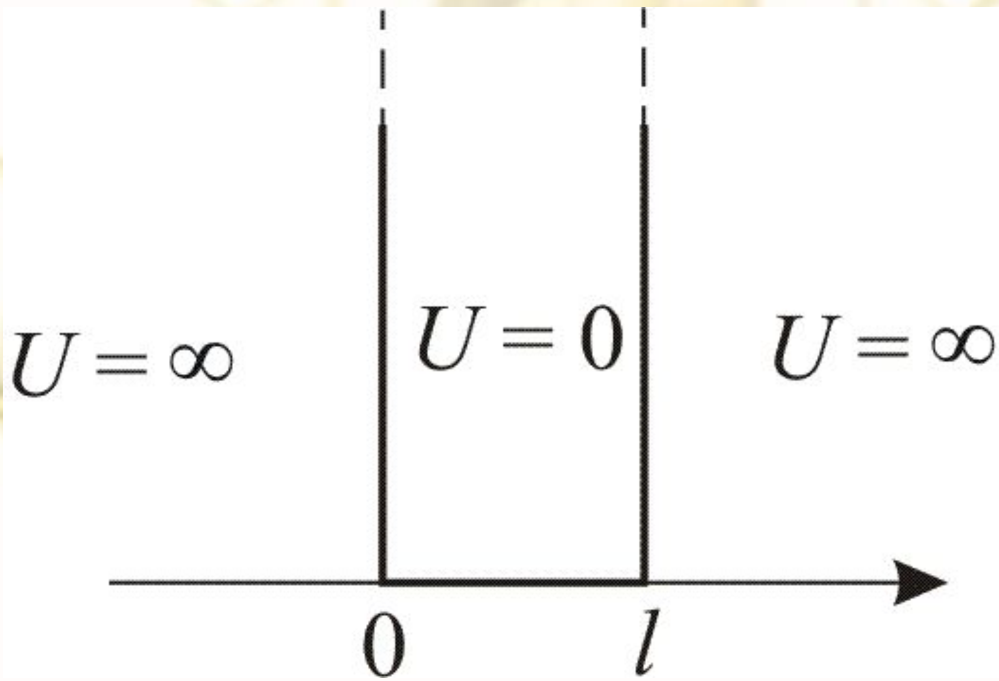
Этому способствует ***не зависящая от времени плотность вероятности обнаружения частицы в данной точке пространства.***

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

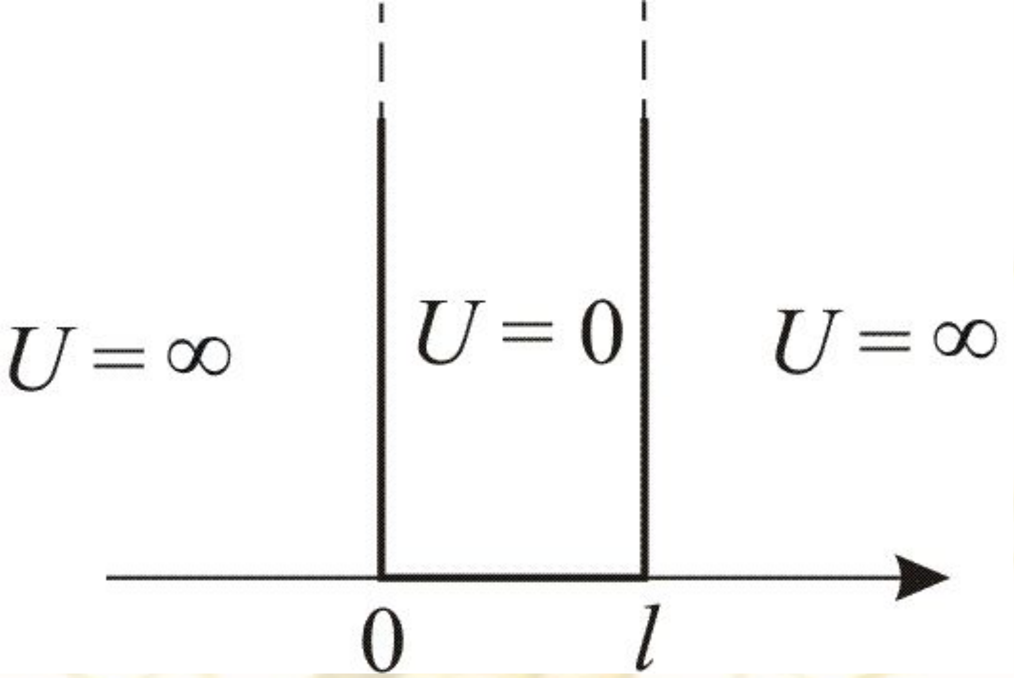
т.е. ***все положения свободной частицы являются равновероятностными.***

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

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



x



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

x

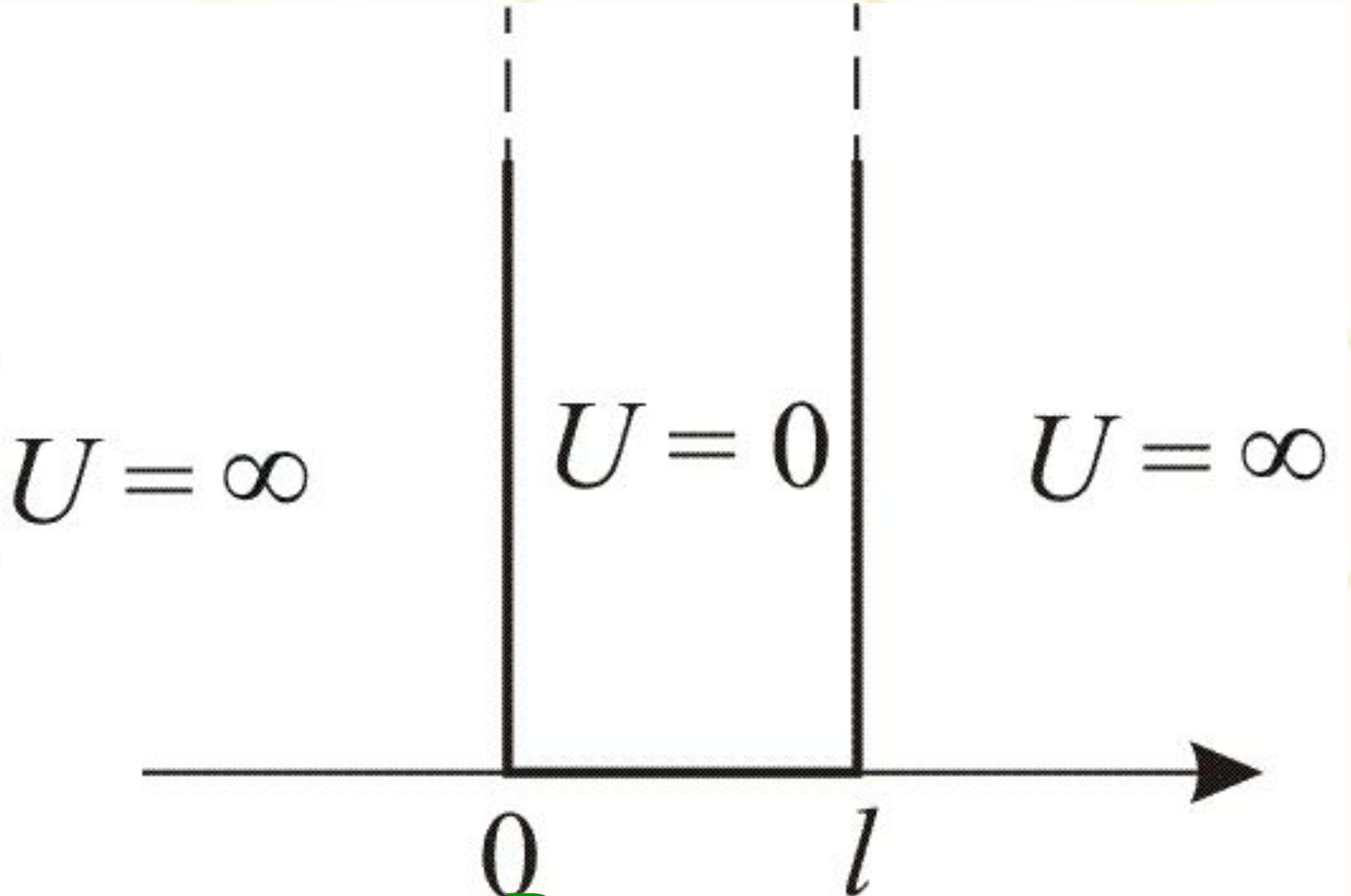


Рисунок 1

x

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

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-U\right)=0 \qquad (5)$$

x

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**

$$\Psi(0) = \Psi(l) = 0 \tag{6}$$

x

В пределах «ямы» ($0 \le x \le l$) уравнение Шредингера (5) сведется к уравнению

(7) $$\boxed{\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + k^2 \Psi = 0,}$$ где $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$.

Общее решение этого дифференциального уравнения

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

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

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

x

Отсюда следует, что:

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ml^2} \qquad (11)$$

где *n* = 1, 2, 3…

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.

x

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.

x

Найдем собственные функции:

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

Постоянную интегрирования *A* найдем *из условия нормировки:*

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

В результате интегрирования получим

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

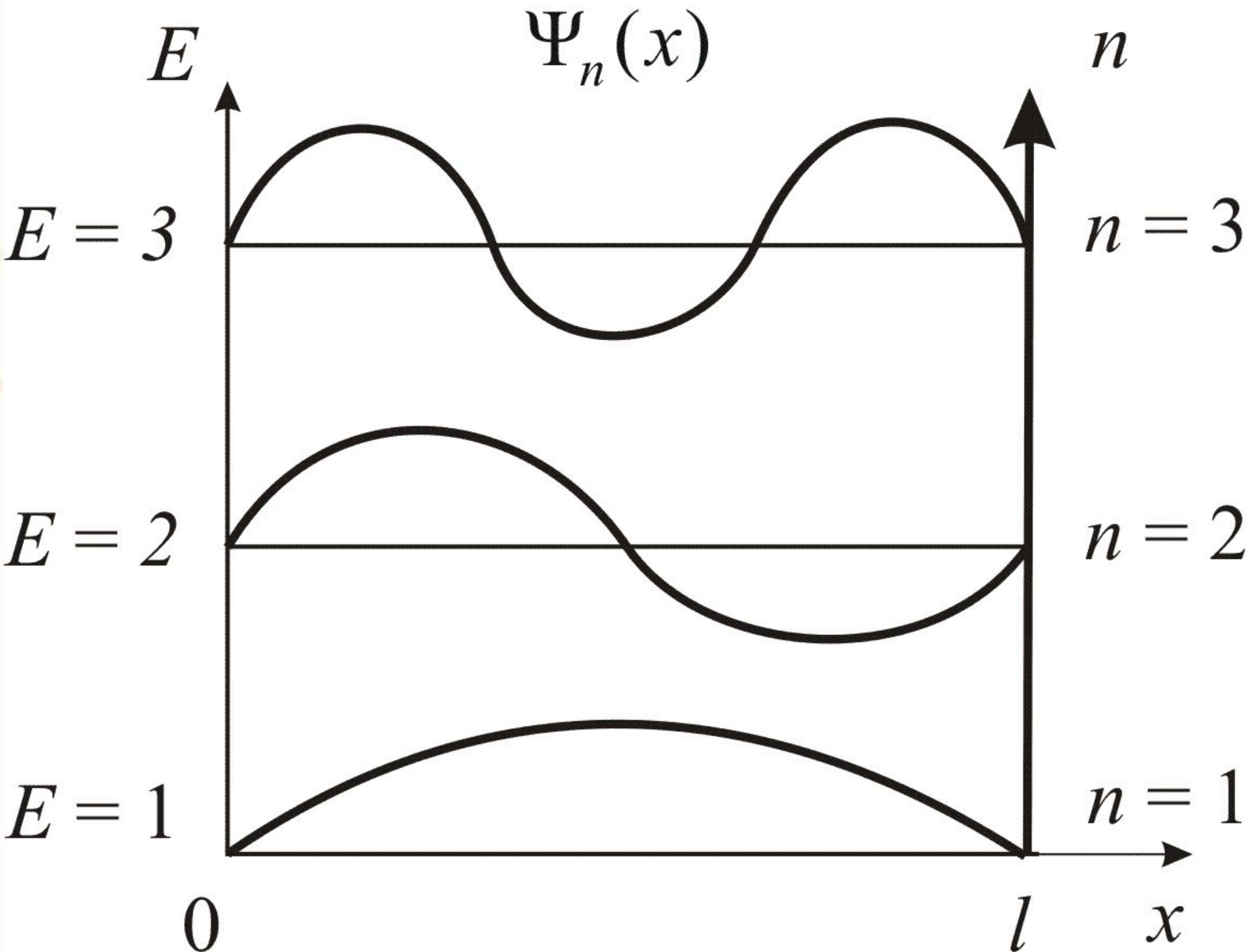
Собственные функции будут иметь вид:

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

где *n* = 1, 2,

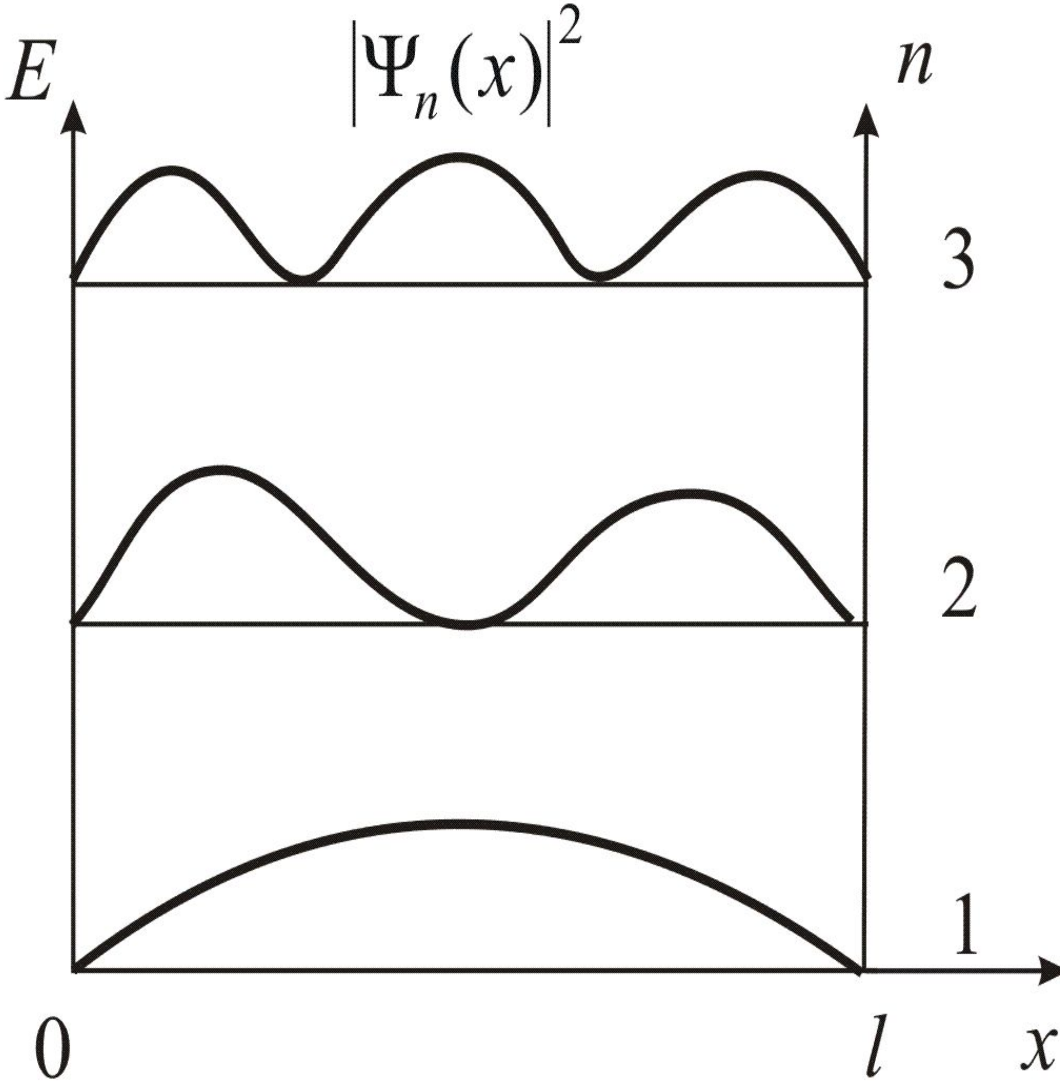
Графики собственных функций $\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}}\sin\left(\frac{n\pi}{l}x\right)$ соответствующие уровням энергии при

***n* = 1, 2, 3…**



x

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.**

Такое поведение частицы указывает на то, что представления о траекториях частицы в квантовой механике

x

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)

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

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

x

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.

x

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* (*при n*=1):

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

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

x

Неопределенность координаты **Δx частицы в яме шириной l равна** $\Delta x = l$.

Тогда согласно соотношению неопределенностей,

$$\Delta x \Delta p \geq \hbar$$

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:***

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

Все остальные уровни имеют энергию, превышающую это

x

Из уравнений (5) и (11) следует, что ***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.***

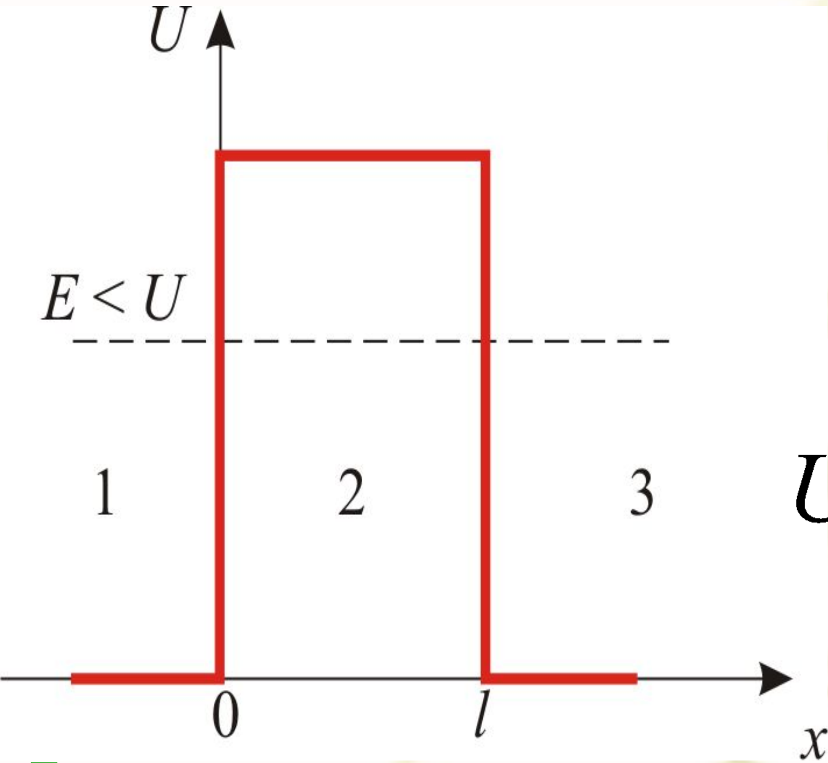
Этот результат является частным случаем ***принципа соответствия Бора*** **(1923 г.) согласно которому законы квантовой механики должны при больших значениях квантовых чисел переходить в законы классической физики.**

x

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.

5. Прохождение частиц сквозь потенциальный барьер. Туннельный эффект



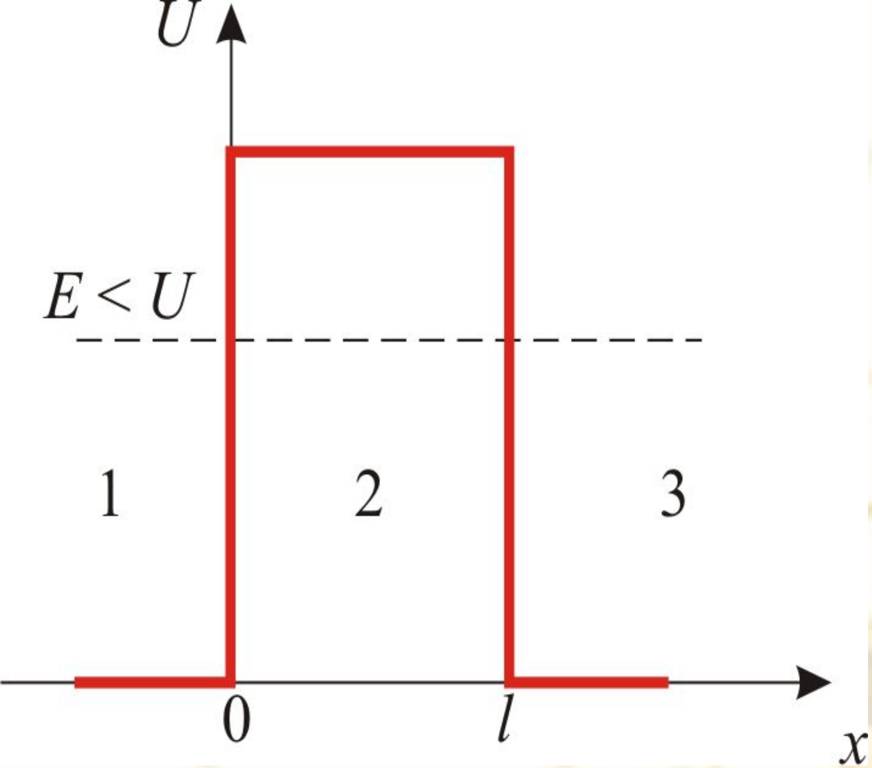
Рассмотрим простейший потенциальный барьер прямоугольной формы высоты *U* и шириной *l* для одномерного (по оси *x*) движения частицы.

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

5 **При данных условиях задачи** ***классическая частица, обладая энергией E:***

либо беспрепятственно пройдет под 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.

x

Уравнение Шредингера **для состояний в каждой из выделенных областей имеет вид:**

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

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

Здесь $q = i\beta$ – мнимое число.

$$\beta=\frac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar}.$$

Общее решение этих дифф. уравнений:

$$\Psi_1(x)=A_1e^{ikx}+B_1e^{-ikx} \quad (1)$$

$$\Psi_2(x)=A_2e^{ikx}+B_2e^{-ikx} \quad (2)$$

$$\Psi_3(x)=A_3e^{ikx}+B_3e^{-ikx} \quad (3)$$

x

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

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

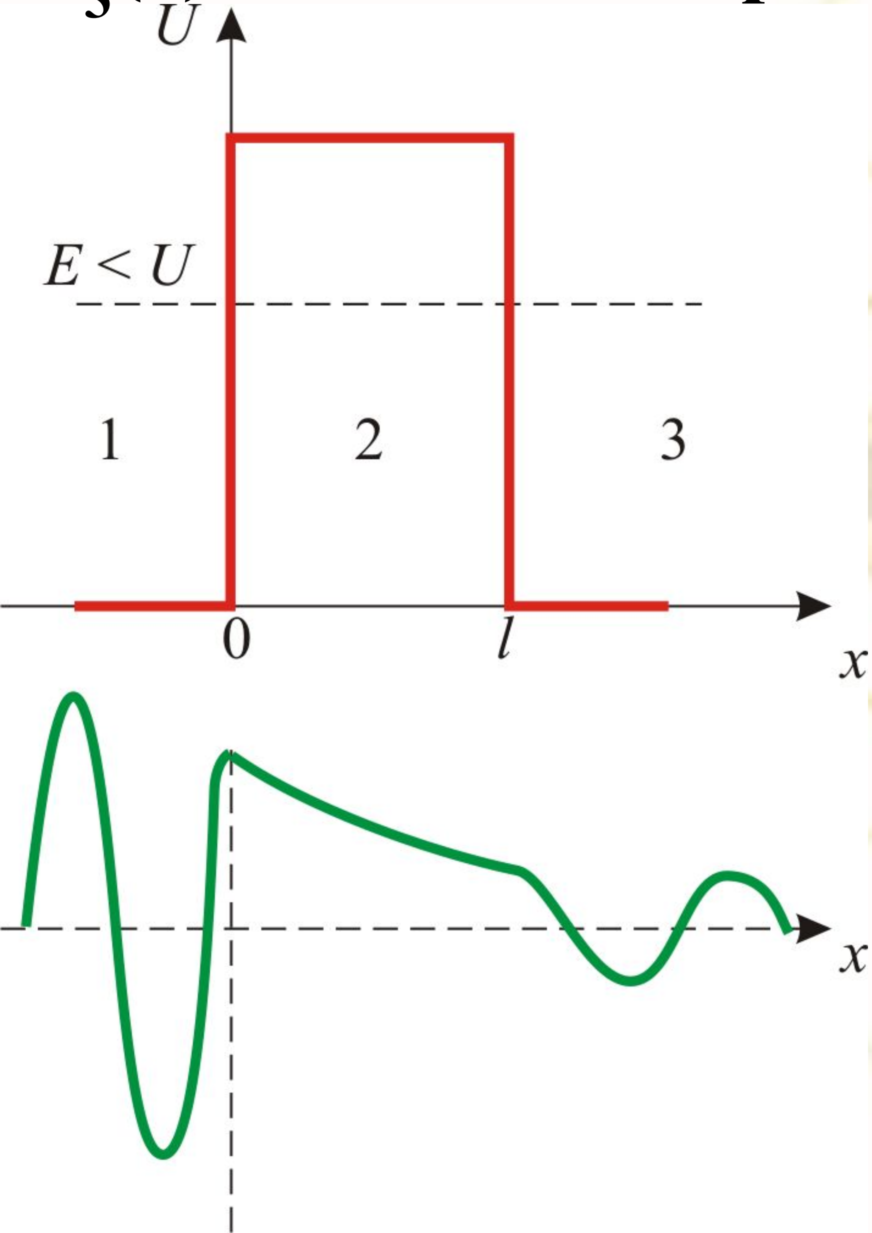
$$\Psi_2(x) = A_2 e^{-\beta x} + B_2 e^{\beta x} \quad (2)$$

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

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

x

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*

Таким образом, *квантовая механика* *приводит к* *принципиально новому квантовому явлению -*

***туннельному эффекту*,**

в результате которого микрообъект может пройти через барьер.

x

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

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

x

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

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

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

Связанная с этим разбросом в значении импульса

кинетическая энергия $\hat{E} = \dfrac{\Delta p^2}{2m}$

***может оказаться достаточной для того, чтобы полная энергия оказалась больше потенциальной*.**

С классической точки зрения прохождение частицы сквозь потенциальный барьер **при** ***$E < U$ 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).**