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 привели к ***новому этапу развития квантовой физики – созданию квантовой механики***, описывающей законы движения и взаимодействия микрочастиц с учетом их волновых свойств. Период с 1900 г. (формулировка Планком квантовой гипотезы) до 20-х годов XX века.

x

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

x

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

$$\Psi(x, y, z, t).$$

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

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

x

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

Вероятность нахождения частицы в объеме V равна:

$$dW = |\Psi|^2 dV$$

x

Условия нормировки вероятностей:

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

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

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

Условие нормировкиволновой функции:

$$\iiint\limits_V |\Psi|^2 dV = 1$$

x

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

- ***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

Волновая функция Ψ является основной характеристикой состояния микрообъектов.

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

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

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.**

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:

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U = \hat{H}$$

– оператор Гамильтона, равный сумме операторов

Гамильтониан является оператором энергии E.

x

3. Движение свободной частицы

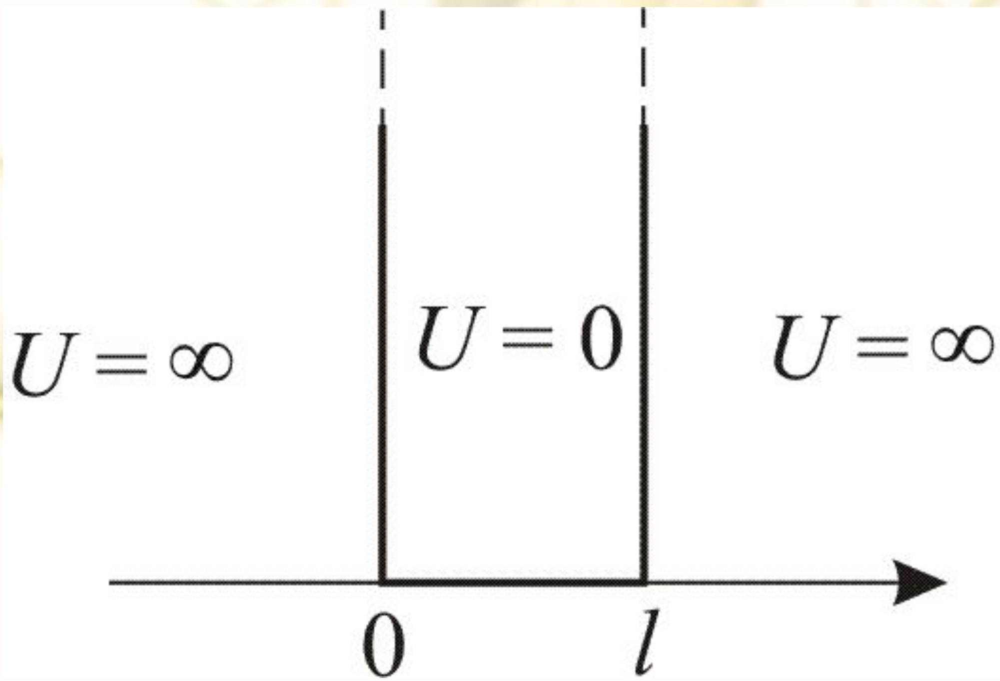
Свободная частица – частица, движущаяся в отсутствие внешних полей.

уравнение Шредингера для стационарных состояний примет вид

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

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

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

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.***

$$\Psi(0) = \Psi(l) = 0 \qquad \textbf{(6)}$$

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 $k^2 = \dfrac{2mE}{\hbar^2}$.

Общее решение этого дифференциального уравнения

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

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

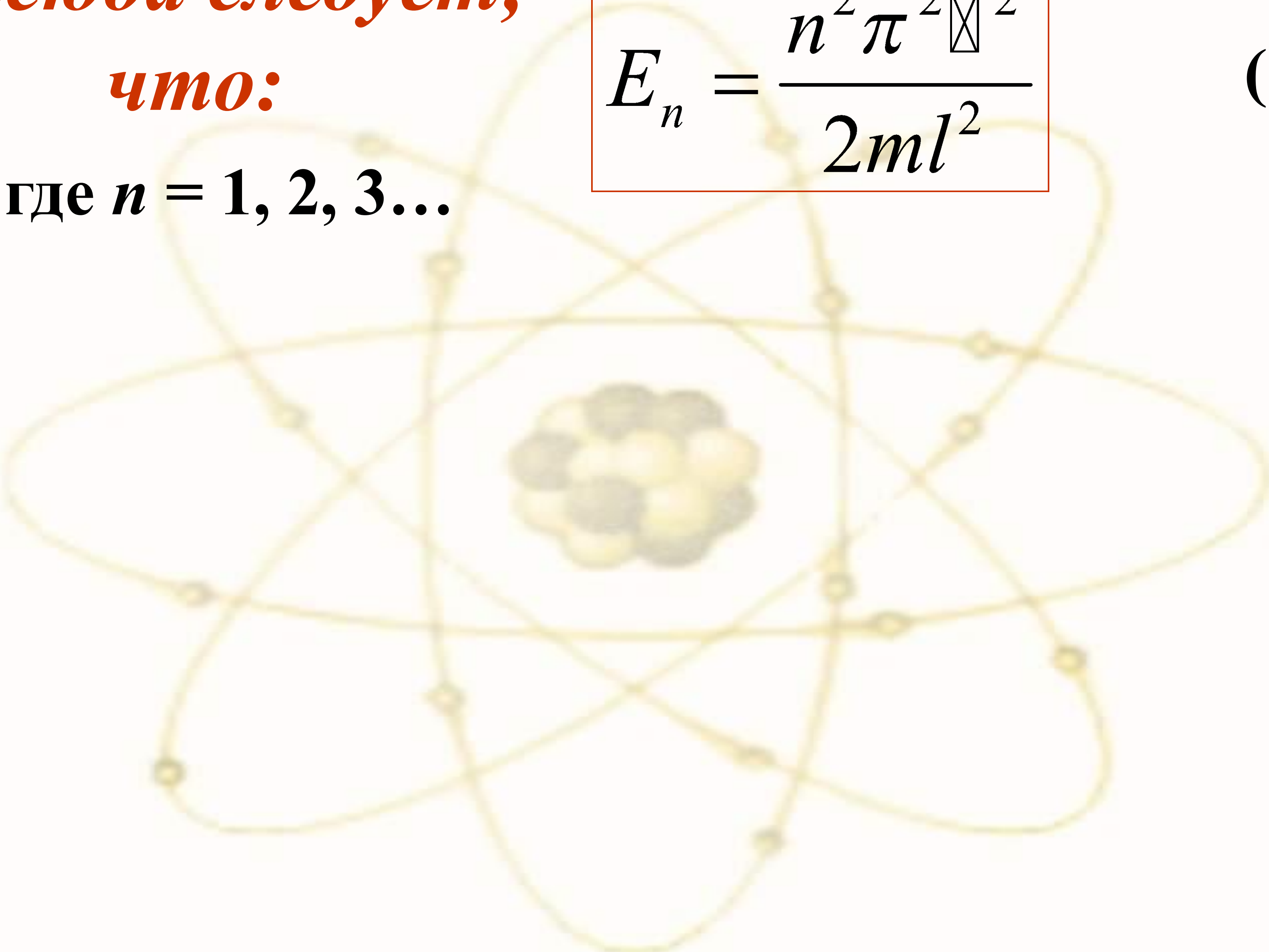
$$\boxed{k = \frac{n\pi}{l}}$$

x

Отсюда следует, что:

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

где $n = 1, 2, 3\ldots$



x

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

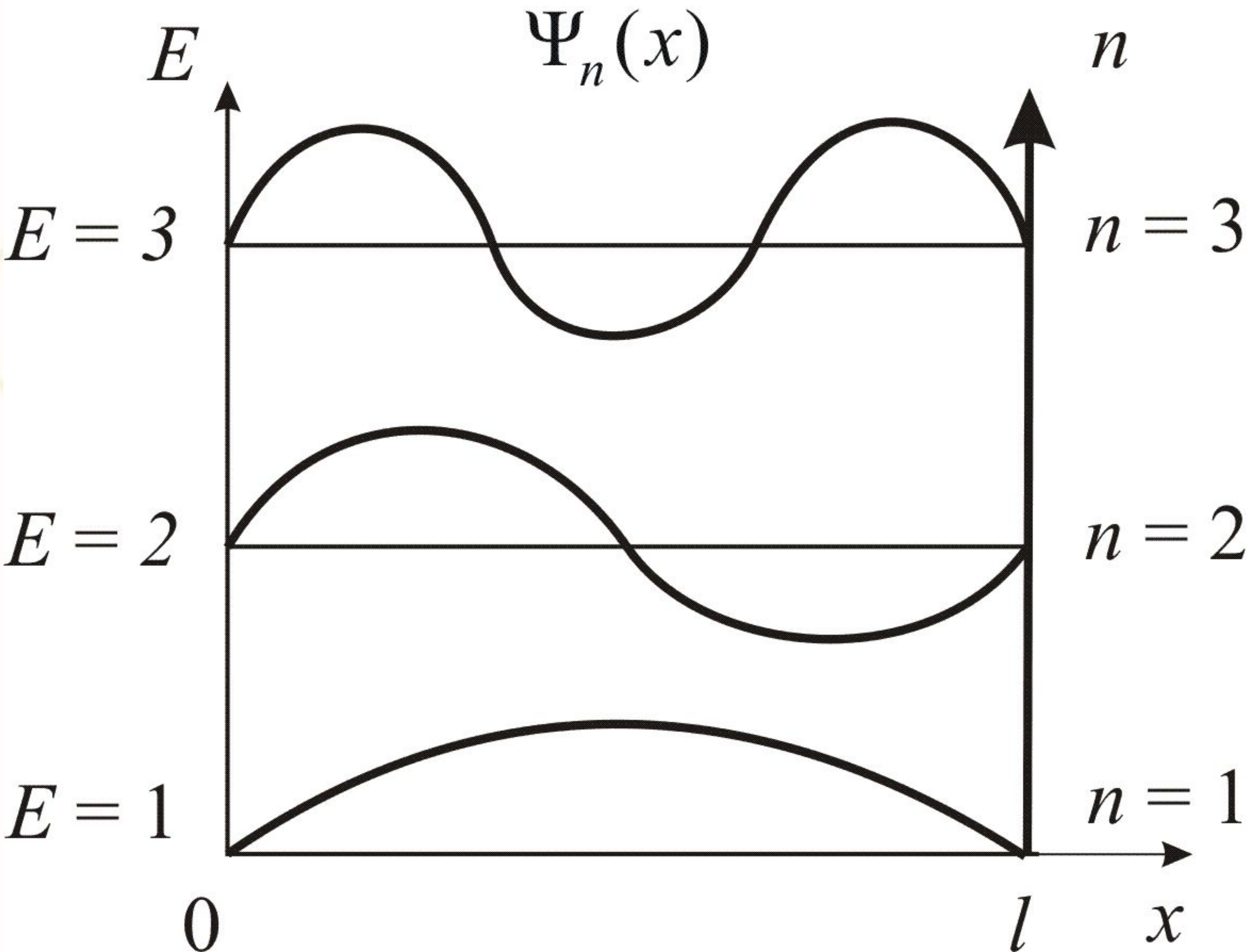
Собственные функции будут иметь вид:

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

где *n* = 1, 2, 3…

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

***n* = 1, 2, 3…**



x

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.**

x

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

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

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

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:*

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

x

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.*

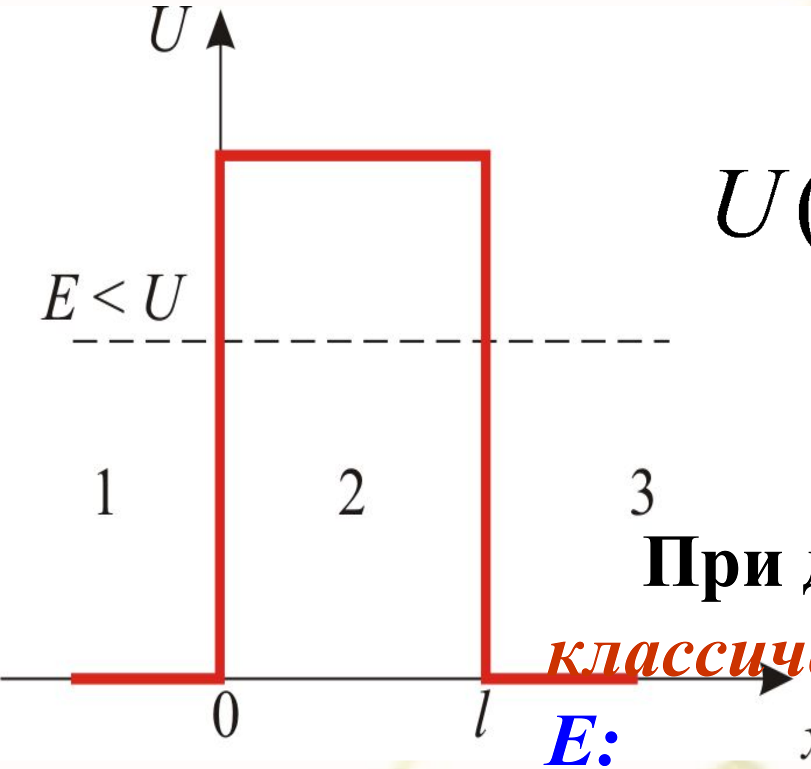
частным случаем *принципа соответствия Бора* (1923 г.)

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.

x

5. Прохождение частиц сквозь потенциальный барьер. Туннельный эффект



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

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

либо беспрепятственно пройдет под барьером,

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

x

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

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

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

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

Общее решение этих дифф. уравнений:

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

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

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

, 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

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

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).**