

Сегодня: *



Краткий курс лекций по физике

Кузнецов Сергей Иванович
доцент к. ОФ ЕНМФ ТПУ



Тема 5. ДВИЖЕНИЕ ЧАСТИЦЫ В ОДНОМЕРНОЙ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЯМЕ

5.1. Движение свободной частицы

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

5.3. Гармонический осциллятор

5.4. Прохождение частиц сквозь
потенциальный барьер. Туннельный эффект

5.1. 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*

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

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

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

$$\Psi(x) = A e^{ikx}$$

где $A = \text{const}$ и $k = \text{const}$, с собственным значением энергии:

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

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

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

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

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

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

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

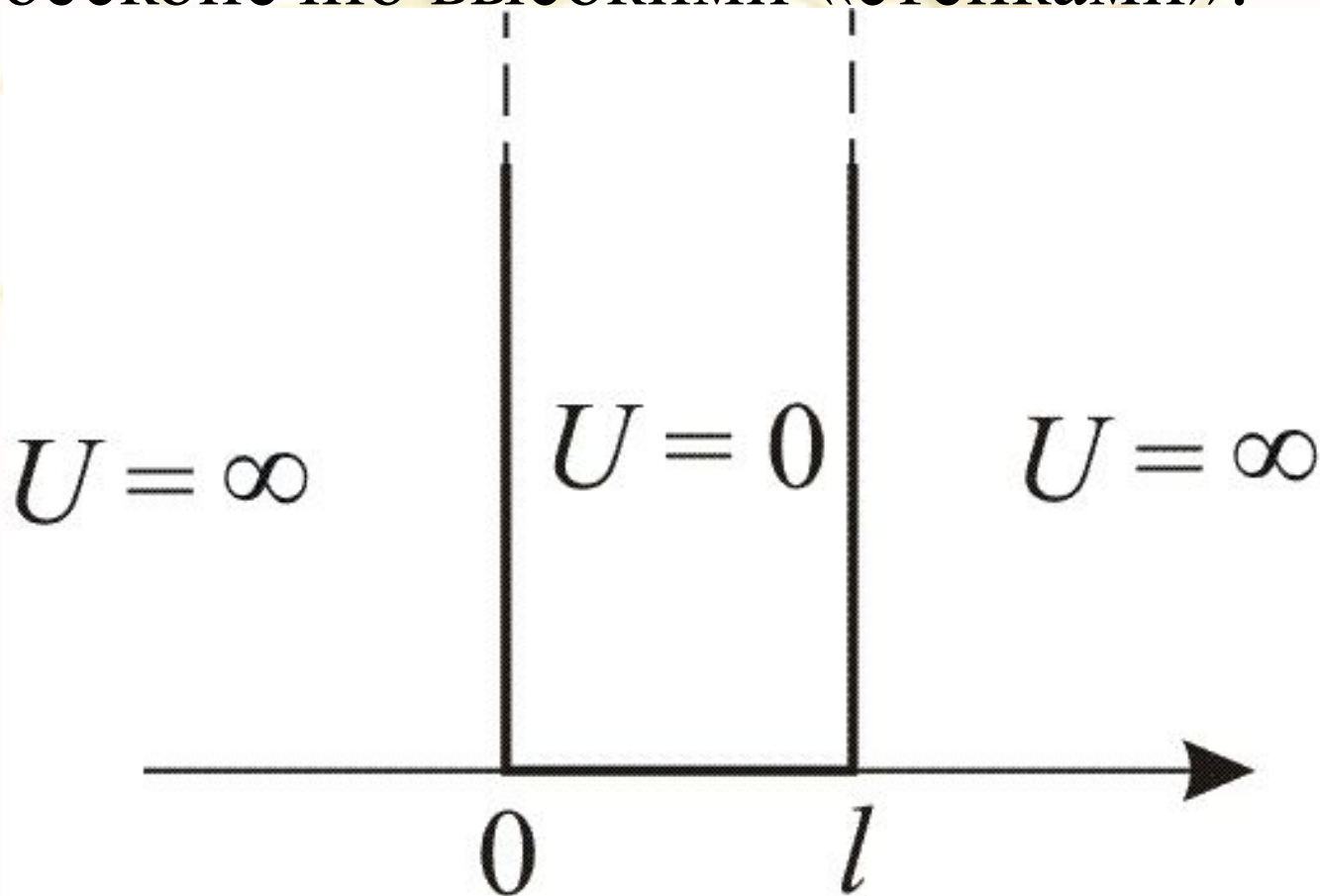
т.е. *все положения свободной частицы являются равновероятными.*

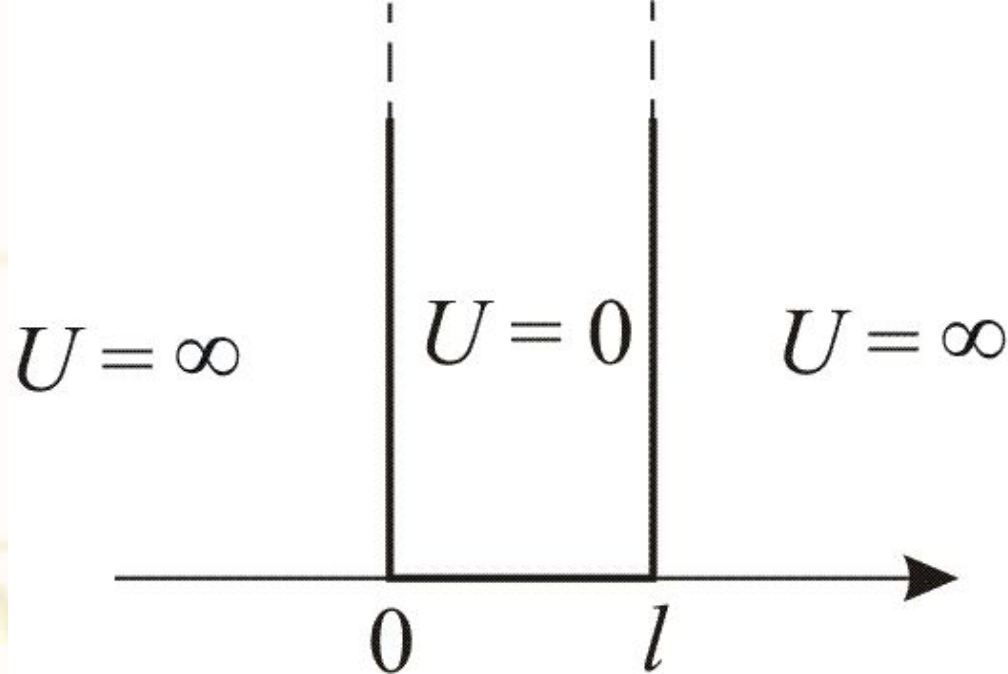
0.2. Частица в одномерной
прямоугольной
яме с бесконечными внешними

«стенками»

Проведем качественный анализ решений

уравнения Шредингера, применительно к частице
в яме с бесконечно высокими «стенками».





Такая яма описывается потенциальной энергией вида

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

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

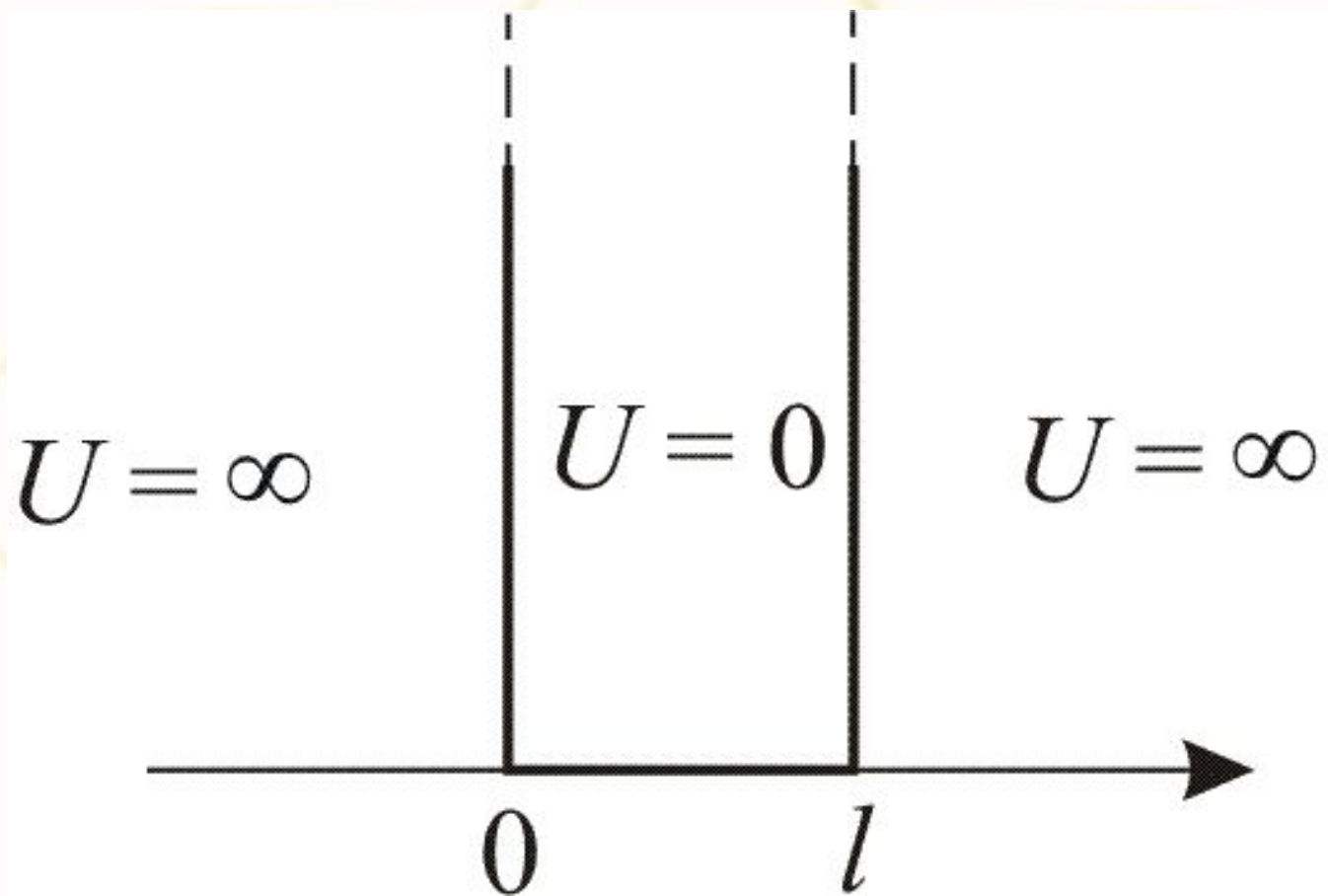


Рисунок 1

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

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

^х *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

$$\Psi(0) = \Psi(l) = 0 \quad (6)$$

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

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

Общее решение дифференциального уравнения (7)

$$\Psi(x) = A \sin kx$$

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

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

Отсюда следует,
что:

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \square^2}{2ml^2} \quad (11)$$

где $n = 1, 2, 3 \dots$

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 называются 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 A найдем *из условия нормировки:*

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

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

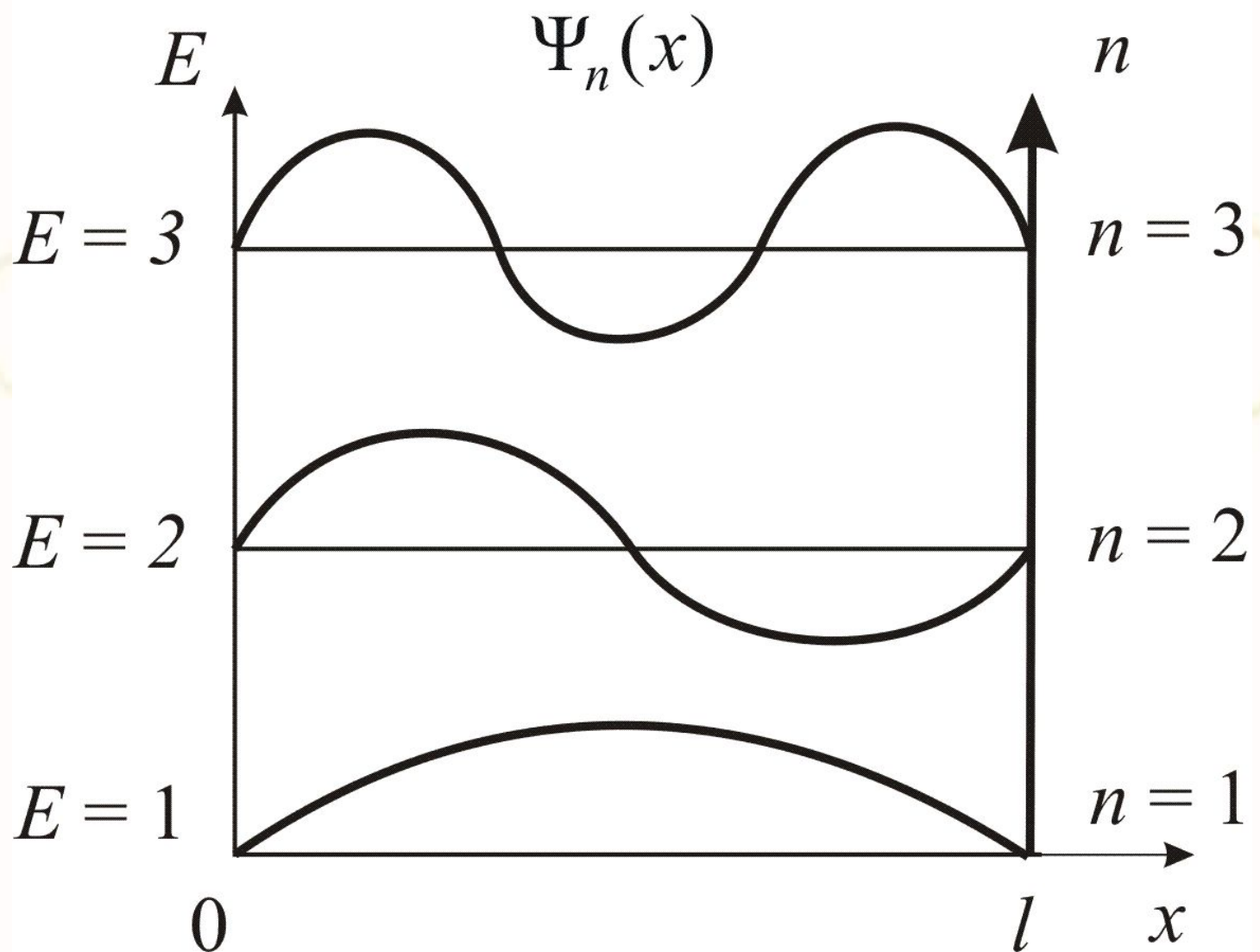
Собственные функции будут иметь вид:

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

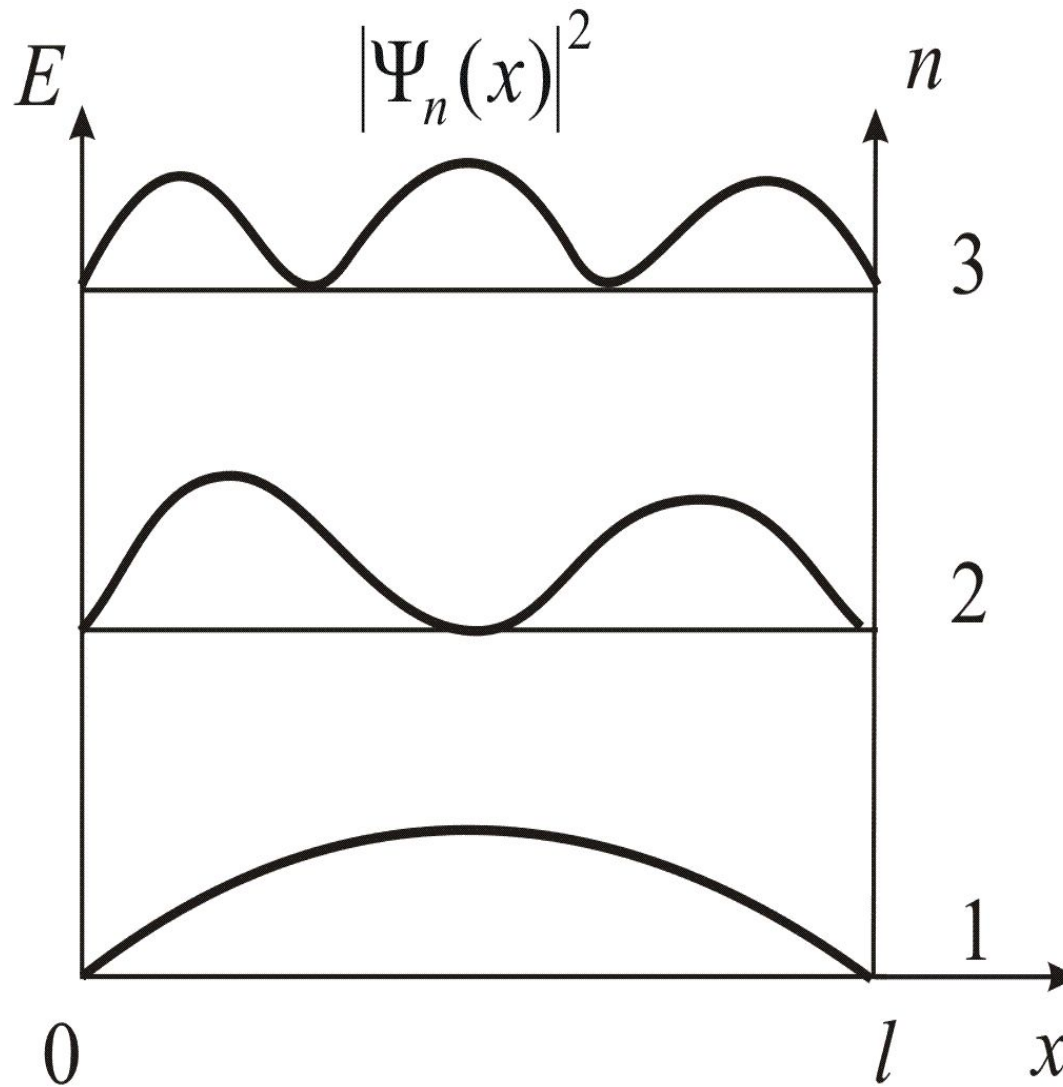
где $n = 1, 2, 3 \dots$

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

соответствующие уровням энергии при $n = 1, 2, 3 \dots$



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 несостоятельны.

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.

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

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

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 (при $n=1$):*

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

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

Σ **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:**

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

Все остальные уровни имеют энергию, превышающую это значение

Из уравнений (5) и (11) следует, что **при больших квантовых числах $n \gg 1$**

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

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.

5.3. Гармонический осциллятор

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

Потенциальная энергия частицы

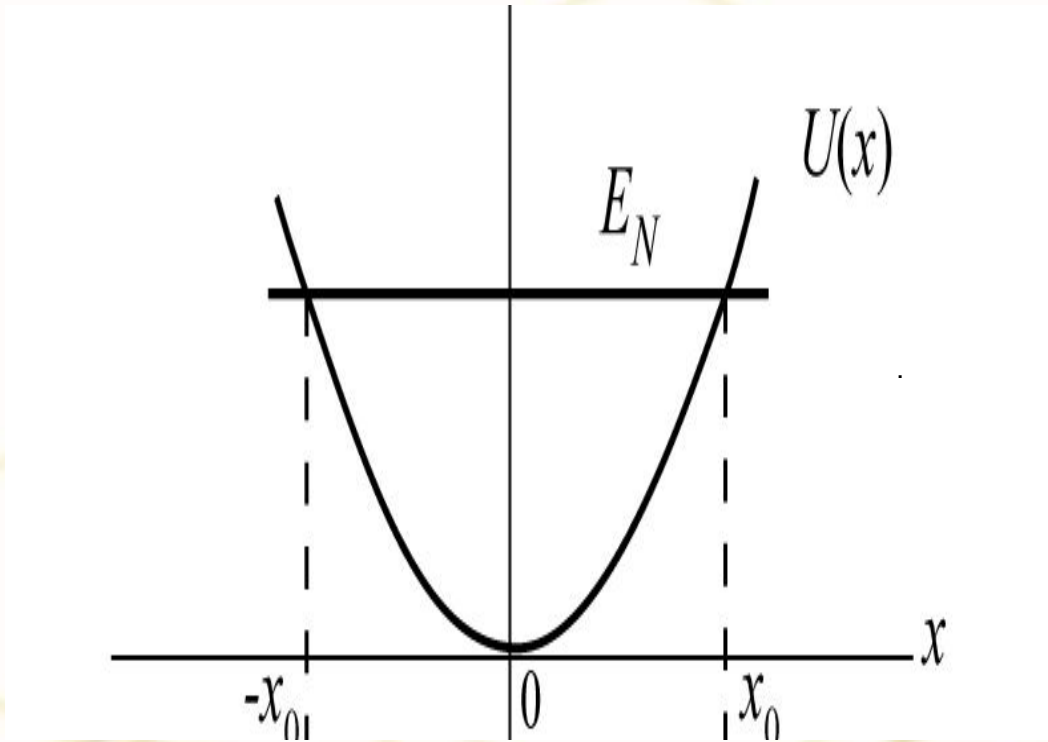
$$U = kx^2 / 2$$

или

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

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:

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

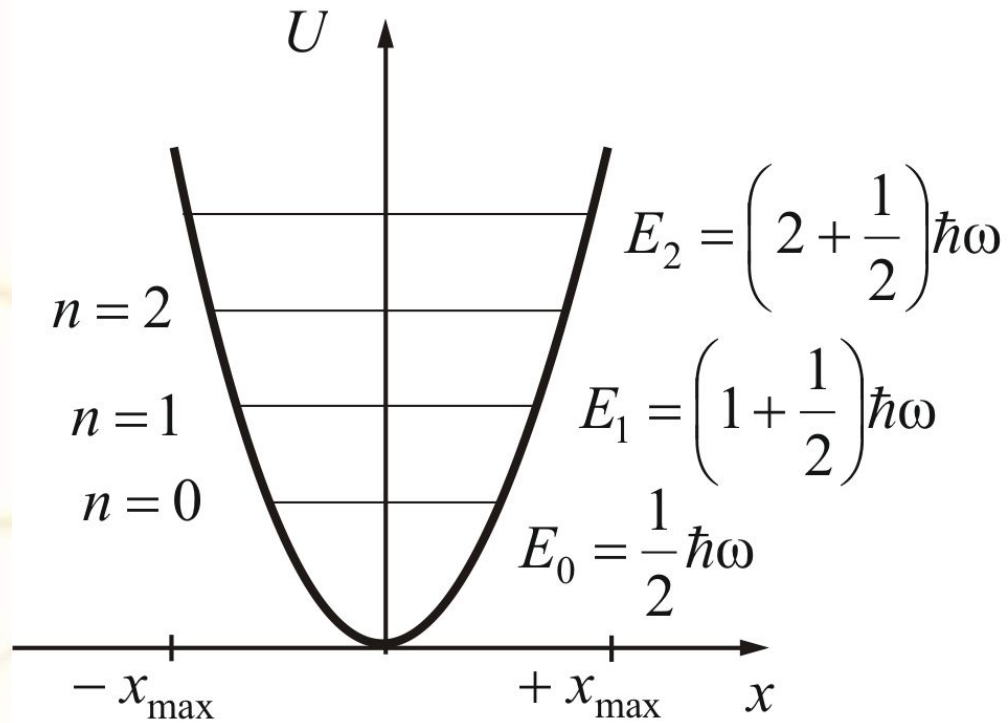
Значения *полной энергии* осциллятора

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

где $n = 0, 1, 2, \dots$

$$\Delta E_n = \hbar\omega \text{ и}$$

не зависит от n .



Минимальная

энергия

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

называется нулевой энергией, т.е. при $T = 0\text{K}$ колебания атомов в кристаллической решетке не прекращаются.

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

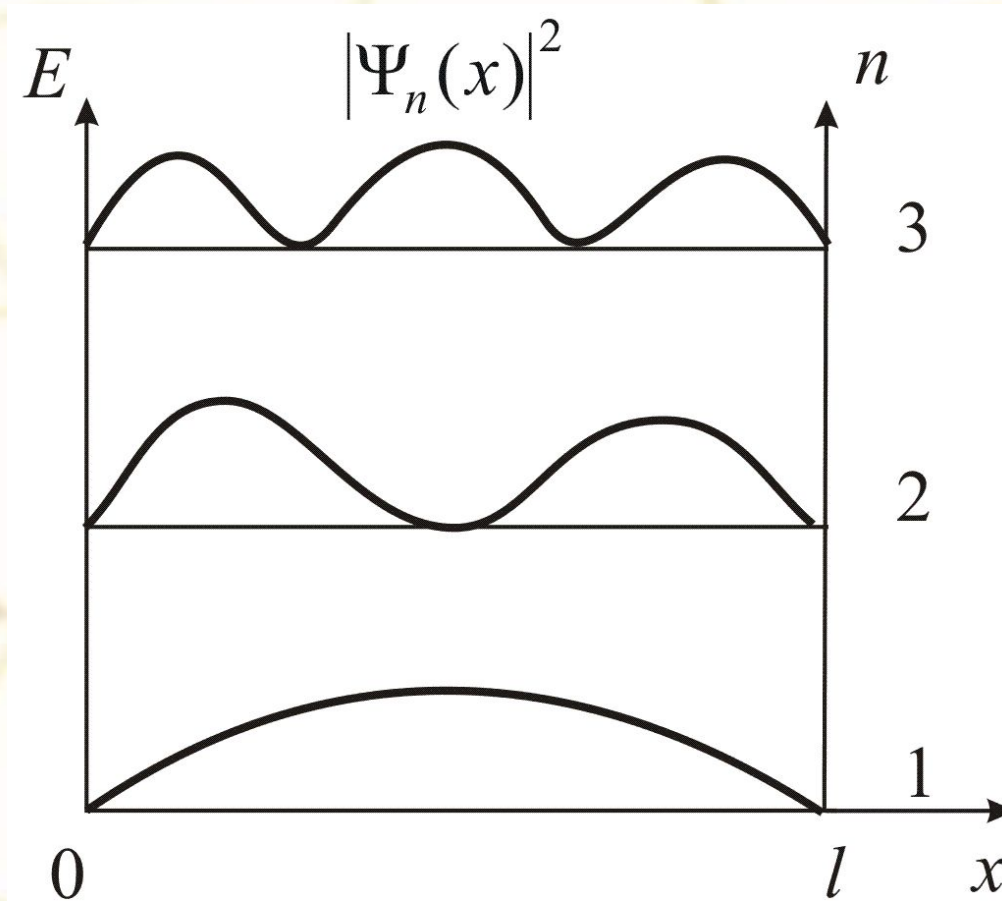
В квантовой механике вычисляется вероятность различных переходов квантовой системы из одного состояния в другое. Для гармонического осциллятора возможны лишь переходы между соседними уровнями.

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

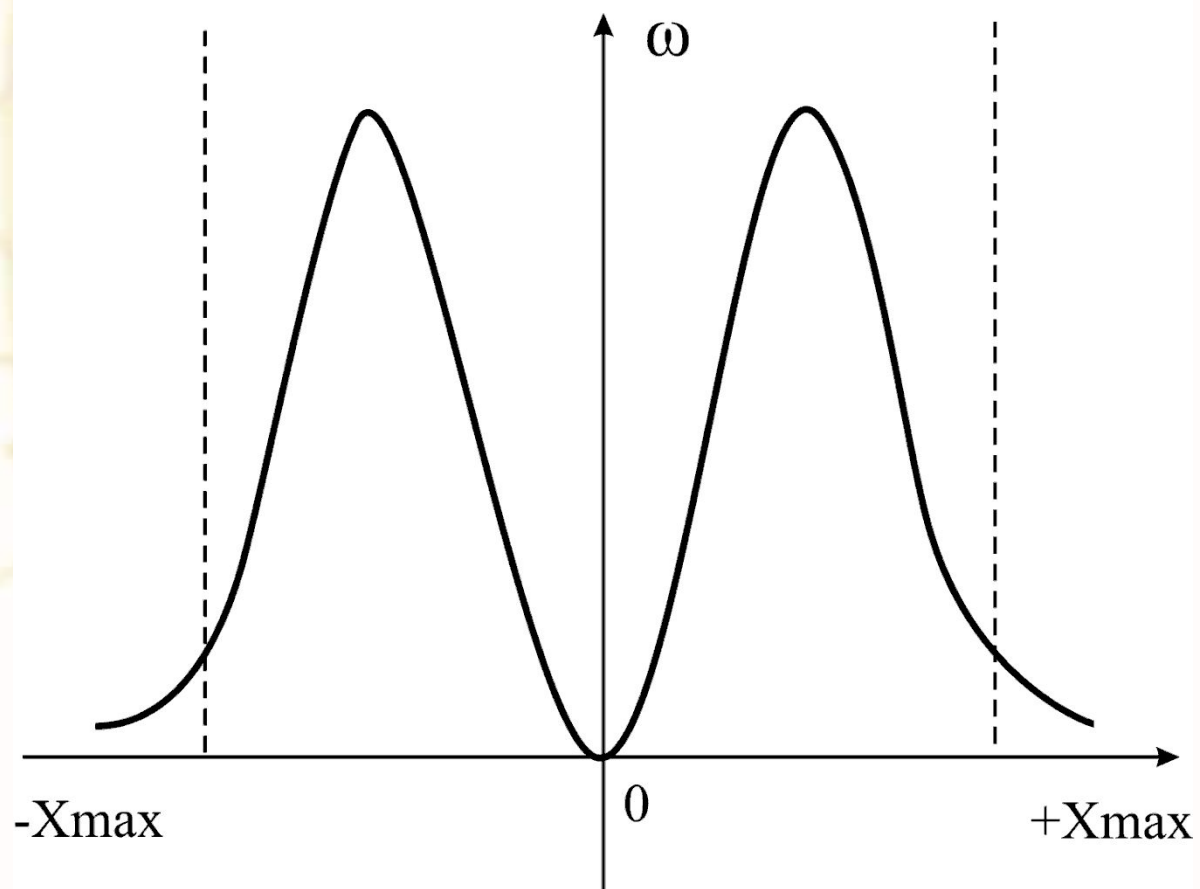
$$E_n = n \hbar \omega$$

Причем *минимальная порция энергии* $E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega$
(Вспомним тепловые излучения, где энергия излучается квантами).

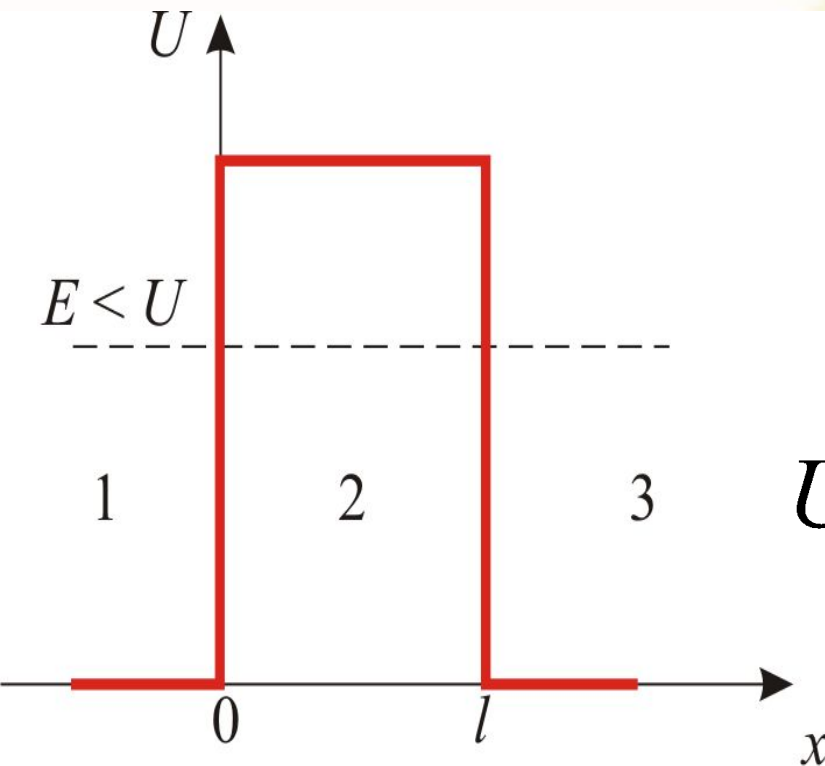
Кроме того например, при $n = 2$ в середине сосуда частицы быть не может. Это совершенно непонятно с классической точки зрения.

Квантуется не только энергия, но и координата частицы!

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.



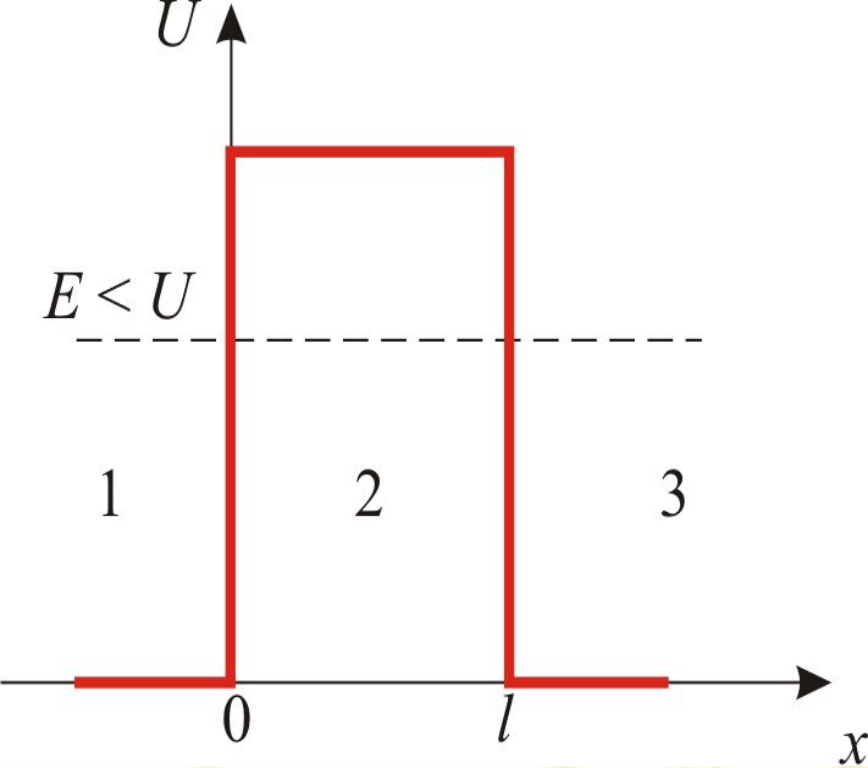
5.4. Прохождение частиц сквозь потенциальный барьер. Туннельный эффект



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

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

При данных условиях задачи **классическая частица**, **обладающая 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.

Уравнение Шредингера для состояний в каждой

из выделенных областей имеет вид:

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

$$\frac{\partial^2 \Psi_2}{\partial x^2} + q^2 \Psi_2 = 0 \quad \left(\text{для } 2 \text{ обл. } q^2 = \frac{2m(E - U)}{\hbar^2} \right)$$

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

Общее решение этих дифф. уравнений:

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

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

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

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

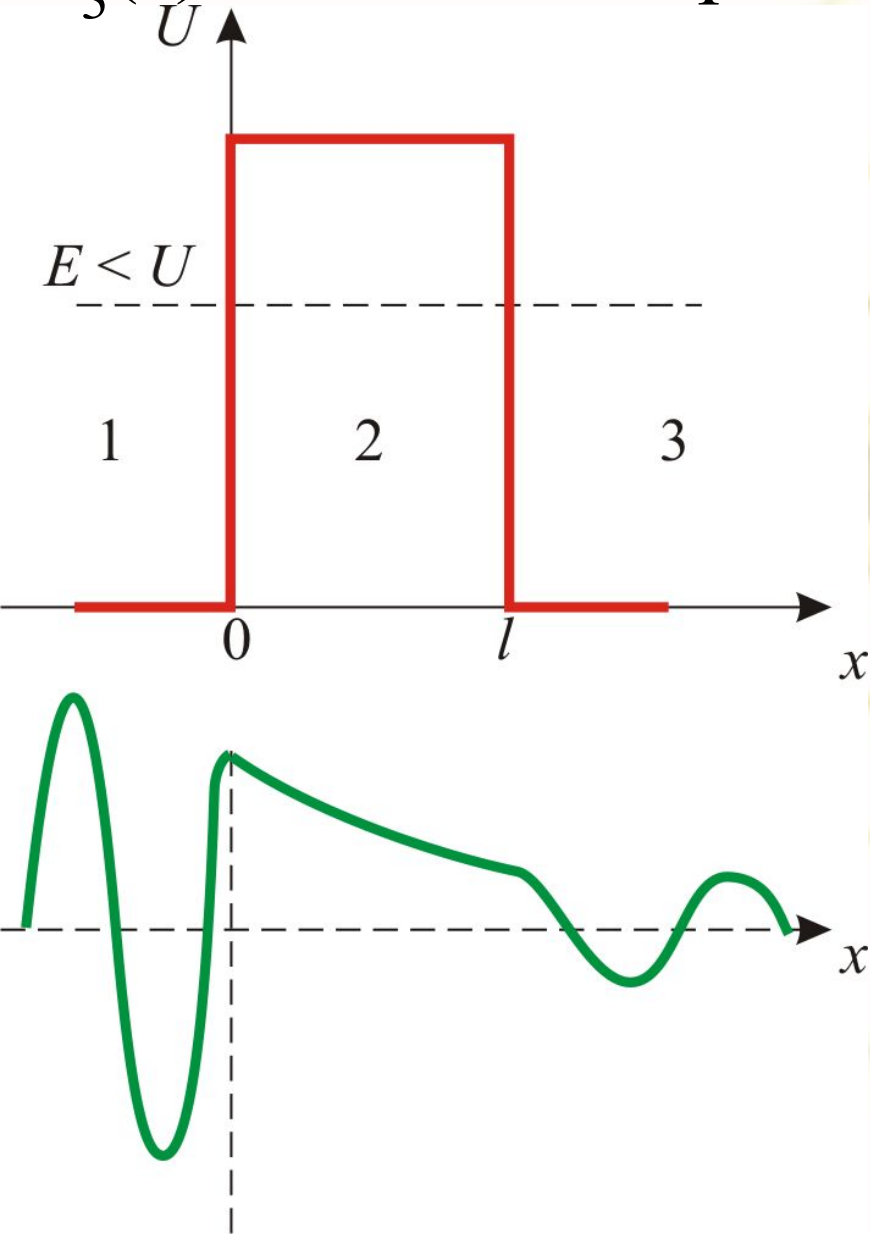
$$\Psi_1(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} \quad (1)$$

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

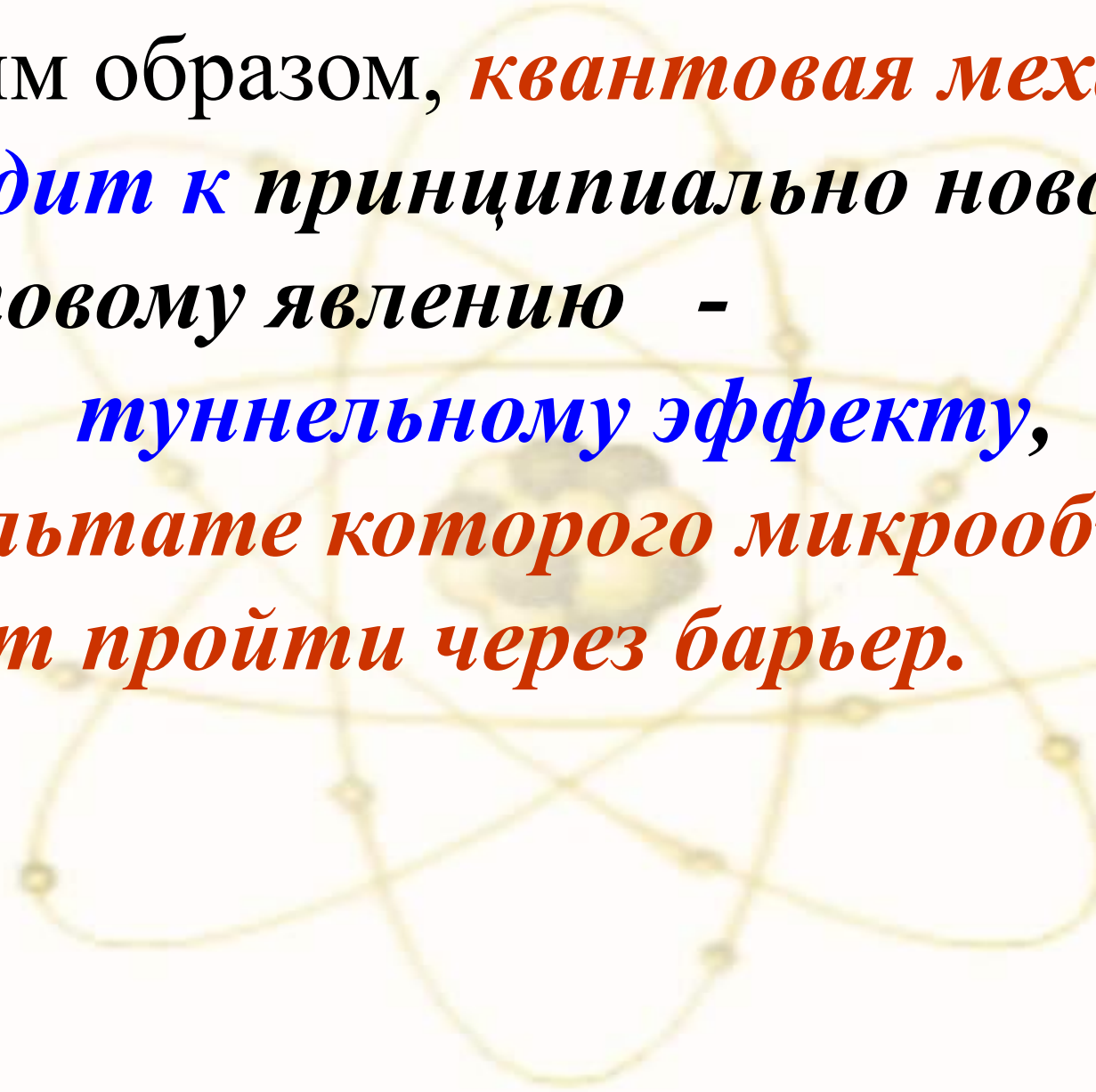
$$\Psi_3(x) = A_3 e^{ikx} \quad (3)$$

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

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

Для барьера произвольной формы

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

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

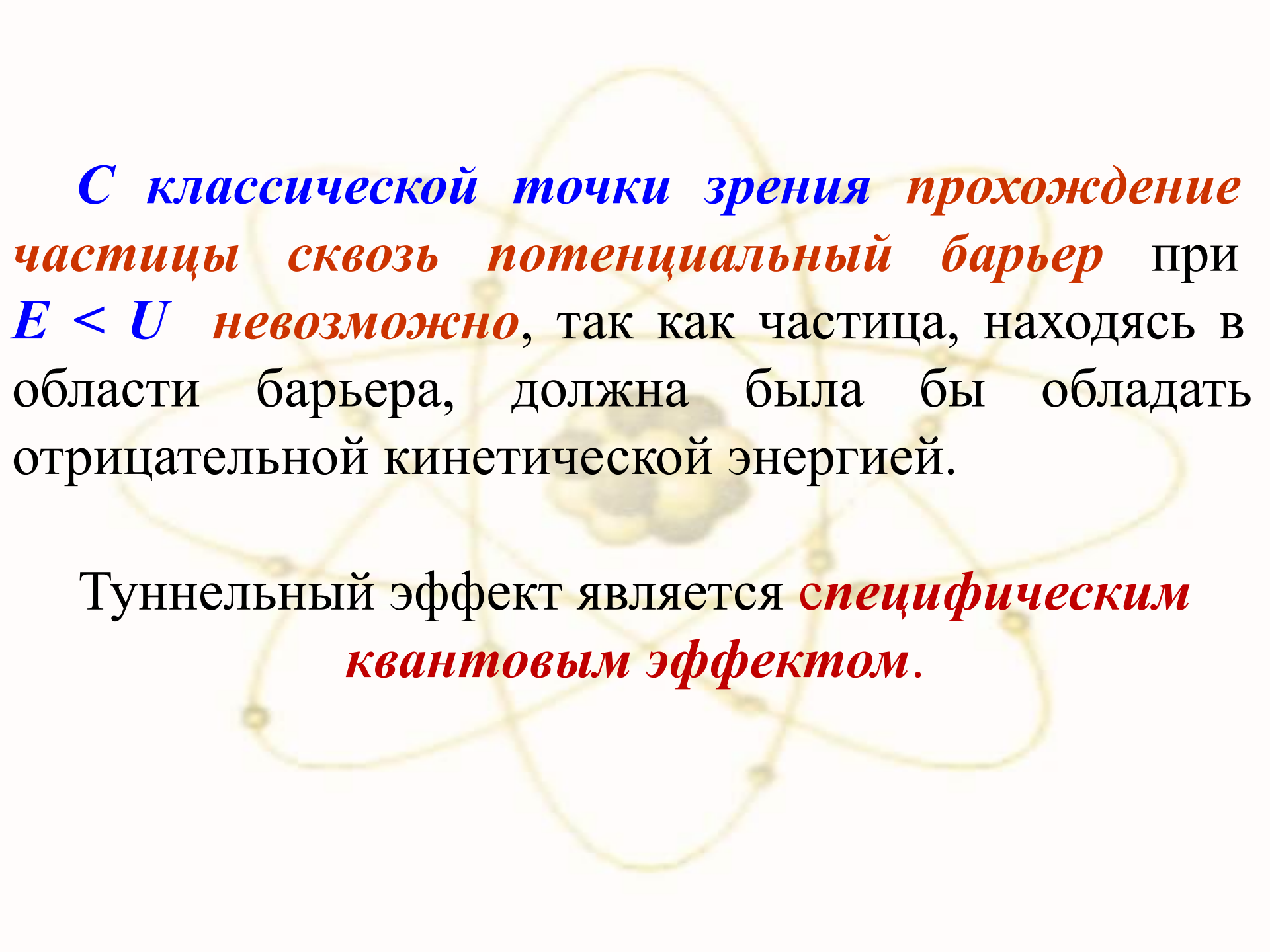
Неопределенность импульса на отрезке $\Delta x = l$ составляет

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

Связанная с этим разбросом в значении импульса

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

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).



Лекция окончена!!!