Сегодня: понедельник, 29 апреля 2024 г.

Лекция 18. Задачи квантовой механики: одномерное движение

Частица и ступенька

Рассмотрим два случая, полная энергия налетающих частиц

- ✓ $E > U_0$
- ✓ $E < U_0$

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ U_0, & x \geq 0 \end{cases}$$

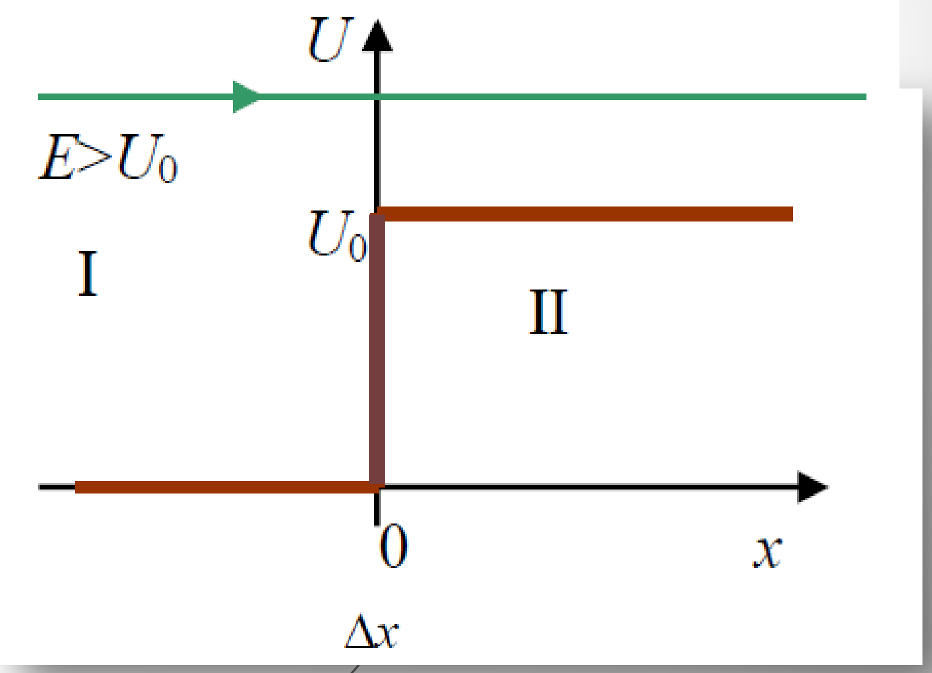
Классика: частица слева с

$$p_I = \sqrt{2mE} = const$$

- ✓ **в области $x \geq 0$, $U = U_0$, замедляется**

$$p_{II} = \sqrt{2m(E - U_0)}$$

- ✓ **Затем $p_{II} = const$**
- ✓ **частица обладает энергией, достаточной, чтобы проникнуть в область $x \geq 0$,**
- ✓ ***полное прохождение*: любая частица с $E > U_0$ движется вправо с меньшей $T = E - U_0$**



Квантово:

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

$$U(x)=\begin{cases}0, & x<0\\ U_0, & x\ge 0\end{cases}$$

$$\begin{cases}\left(\frac{d^2}{dx^2}+k_1^2\right)\psi_1(x)=0 \quad (x<0)\\ \left(\frac{d^2}{dx^2}+k_2^2\right)\psi_2(x)=0 \quad (x\ge 0)\end{cases}$$

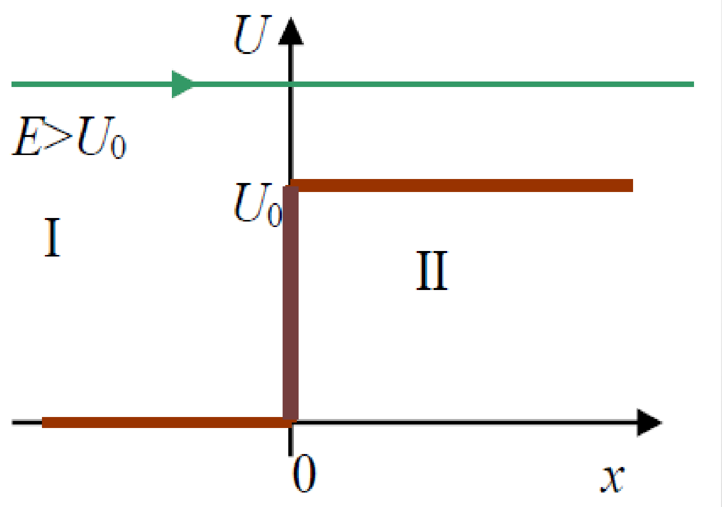
$$k_1^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$k_2^2=\frac{2m(E-U_0)}{\hbar^2}$$

Общие решения - плоские волны:

$$\psi_1(x)=Ae^{ik_1x}+Be^{-ik_1x} \quad (x<0)$$

$$\psi_2(x)=Ce^{ik_2x}+De^{-ik_2x} \quad (x\ge 0)$$

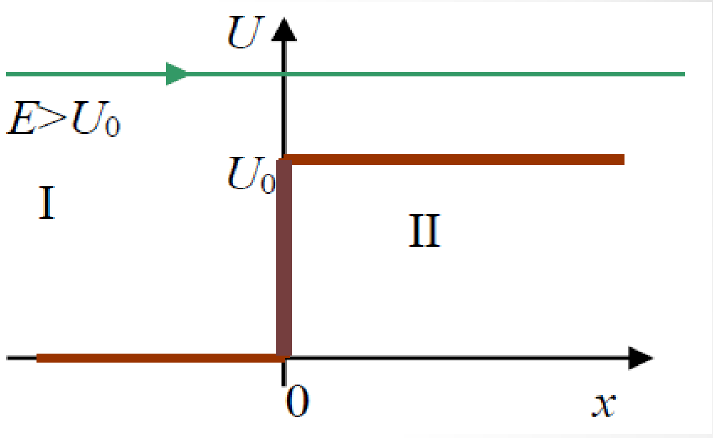


Ни одна волна не отражается барьера *слева*, $D = 0$. Полная волновая функция

$$\Psi(x,t)=\begin{cases}\psi_1(x)e^{-i\omega t}=Ae^{i(k_1x-\omega t)}+Be^{-i(k_1x-\omega t)} & x<0\\ \psi_2(x)e^{-i\omega t}=Ce^{i(k_2x-\omega t)} & x\ge 0\end{cases}$$

$$\Psi(x,t)=\begin{cases}\psi_1(x)e^{-i\omega t}=Ae^{i(k_1x-\omega t)}+Be^{-i(k_1x-\omega t)} & x<0\\ \psi_2(x)e^{-i\omega t}=Ce^{i(k_2x-\omega t)} & x\geq 0\end{cases}$$

$$|\psi(x)|^2=\left|Ce^{i(k_2x-\omega t)}\right|^2=|C|^2$$



Коэффициенты отражения и прохождения

$$\boxed{R=\left|\frac{\text{плотность отраженного потока}}{\text{плотность падающего потока}}\right|=\left|\frac{J_{отр}}{J_{пад}}\right|,\quad T=\left|\frac{J_{прош}}{J_{пад}}\right|}$$

$$\psi_i(x)=Ae^{ik_1x}$$

$$\psi_r(x)=Be^{-ik_1x}$$

$$\psi_t(x)=Ce^{ik_2x}$$

$$J_i=\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi_i\frac{d\psi_i^*}{dx}-\psi_i^*\frac{d\psi_i}{dx}\right)=\frac{\hbar k_1}{m}|A|^2$$

$$J_r=-\frac{\hbar k_1}{m}|B|^2,\qquad J_t=\frac{\hbar k_2}{m}|C|^2,$$

$$\boxed{R=\frac{|B|^2}{|A|^2},\qquad T=\frac{k_2}{k_1}\frac{|C|^2}{|A|^2}}$$

Для нахождения *B* и *C* используем

1. **граничные условия при $x = 0$**
2. **условие «сшивания»: непрерывность при $x = 0$**

$$\psi_1(0) = \psi_2(0)$$

$$\frac{d\psi_1(0)}{dx} = \frac{d\psi_2(0)}{dx}$$

$$A + B = C,$$

$$k_1(A - B) = k_2 C$$

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

A **- определяем из условия нормировки**

$$\boxed{R = \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2} = \frac{(1 - \mathrm{K})^2}{(1 + \mathrm{K})^2}, \quad T = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2} = \frac{4\mathrm{K}}{(1 + \mathrm{K})^2}}$$

$$\boxed{\mathrm{K} = \frac{k_2}{k_1} = \sqrt{1 - \frac{U_0}{E}}}$$

$$\boxed{R + T = 1}$$

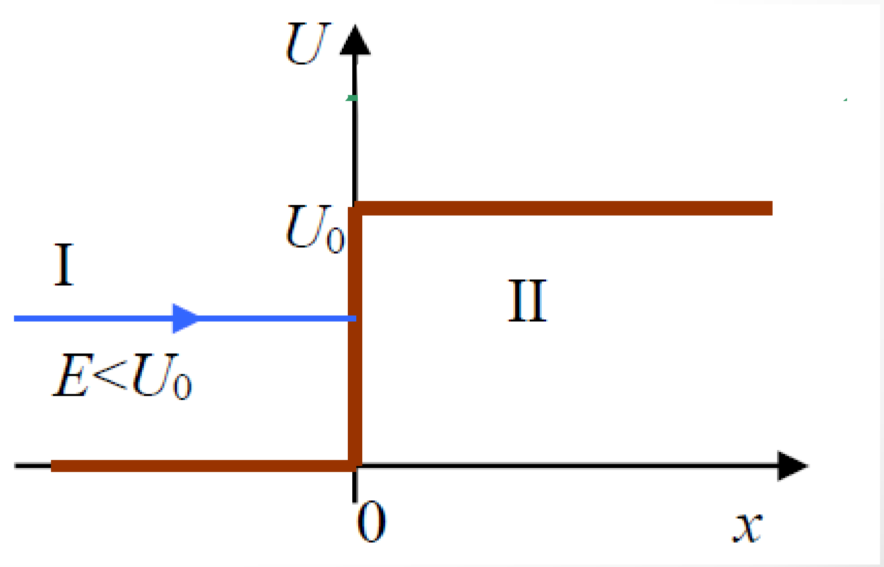
$R \neq 0$ (!): существуют частицы, которые отражаются, хотя летят над барьером!

ступенька: $E < U_0$

Классика: частица движется слева с

$$p_I = \sqrt{2mE} = const$$

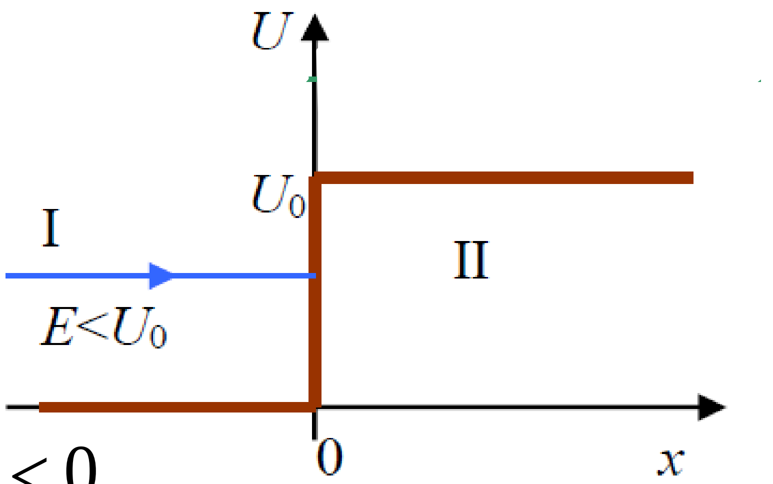
- ✓ Налетают на барьер при $x \geq 0$
- ✓ Отскакивают, сохраняя импульс p_I
- ✓ Ни одна из частиц не попадет внутрь барьера
- ✓ Происходит полное отражение частиц.



Квантово: $$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+U(x)\psi(x)=E\psi(x)$$

$$\left(\frac{d^2}{dx^2}-k_2'^2\right)\psi_2(x)=0 \quad (x\geq 0)$$

$$\boxed{k_2'^2=\frac{2m(U_0-E)}{\hbar^2}}$$



Решение уравнения

$$\psi_2(x)=Ce^{-k_2'x}+De^{k_2'x} \quad (x\geq 0)$$

полная волновая функция

$$\Psi(x,t)=\begin{cases} Ae^{i(k_1x-\omega t)}+Be^{-i(k_1x-\omega t)}, & x<0 \\ Ce^{-k_2'x}e^{-i\omega t}, & x\geq 0 \end{cases}$$

$\psi_t(x)=Ce^{-k_2'x}$ **вещественная, т.е.** $\psi_t^*(x)=\psi_t(x)$

$$J_{прош}=\frac{\hbar}{2im}\left(\psi_t(x)\frac{d\psi_t(x)}{dx}-\psi_t(x)\frac{d\psi_t(x)}{dx}\right)=0$$

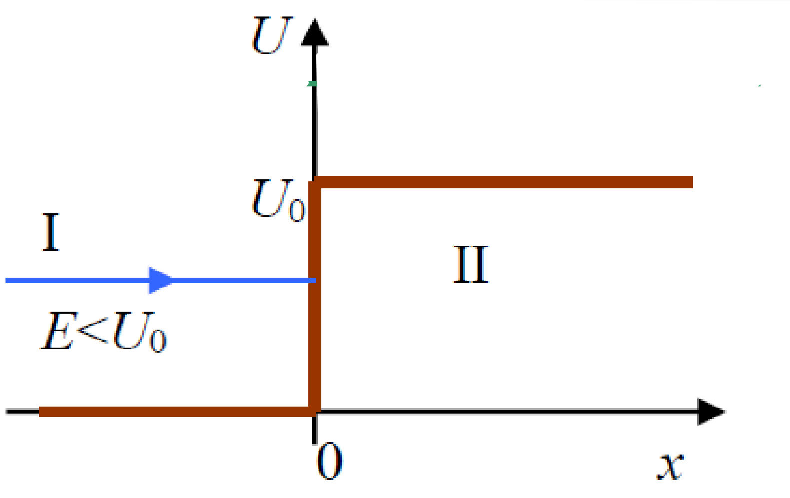
$$\Psi(x,t)=\begin{cases} Ae^{i(k_1x-\omega t)}+Be^{-i(k_1x-\omega t)}, & x<0 \\ Ce^{-k_2'x}e^{-i\omega t}, & x\ge 0 \end{cases}$$

$$\boxed{\psi_1(0)=\psi_2(0),\quad \frac{d\psi_1(0)}{dx}=\frac{d\psi_2(0)}{dx}}$$

$$B=\frac{k_1-ik_2'}{k_1+ik_2'}A,\quad C=\frac{2k_1}{k_1+ik_2'}A$$

Коэффициент отражения

$$\boxed{R=\frac{|B|^2}{|A|^2}=\frac{k_1^2+k_2'^2}{k_1^2+k_2'^2}=1}$$



Полное отражение, как в классическом случае (!)

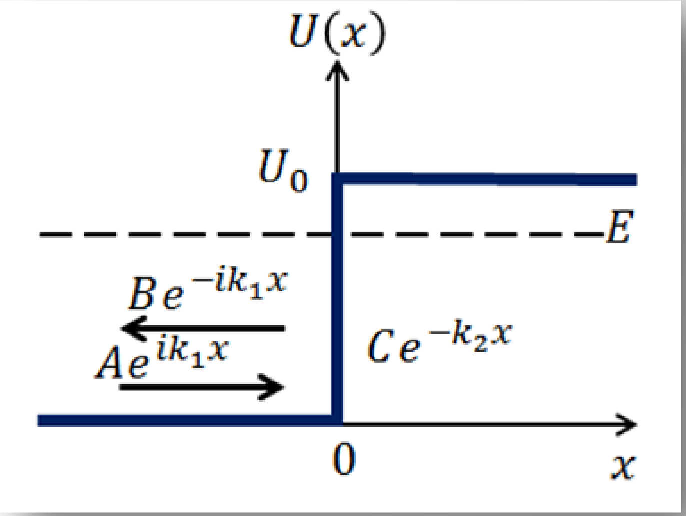
Но!

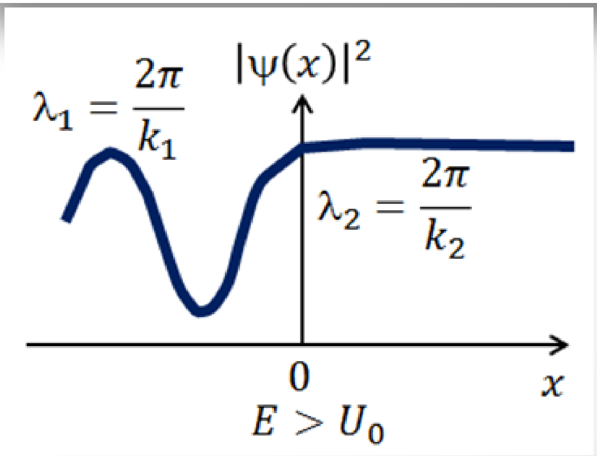
Квантово-механически существует **ненулевая вероятность** того, что частица проникает в **классически запрещенную область**, так как относительная плотность вероятности

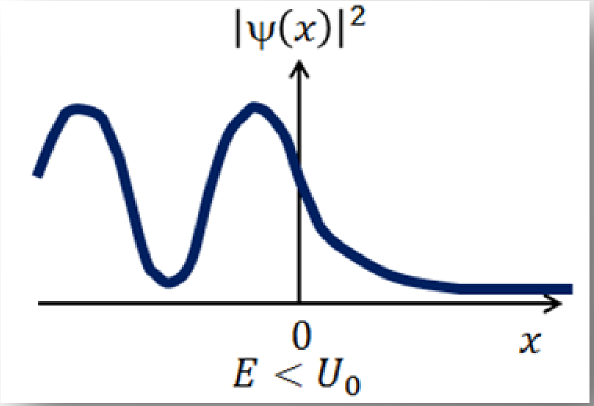
$$P(x) = \left|\psi_t(x)\right|^2 =$$

$$= \left|C\right|^2 e^{-2k_2' x} = \frac{Ak_1^2 \left|A\right|^2}{k_1^2 + k_2'^2} e^{-2k_2' x}$$

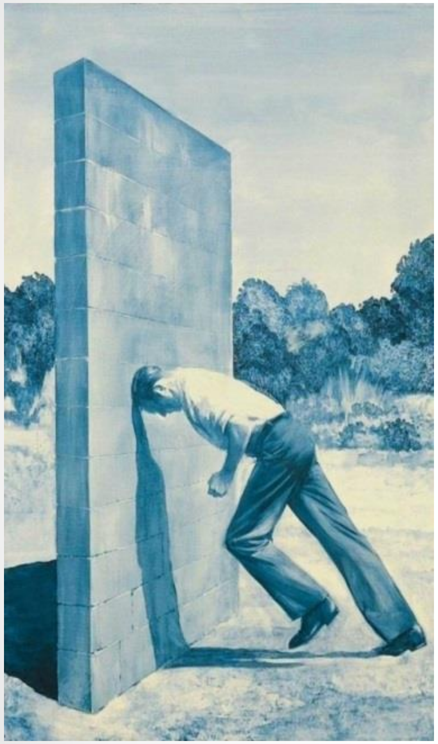
ненулевая вблизи $x = 0$ и экспоненциально уменьшается с ростом x.







Туннельный эффект

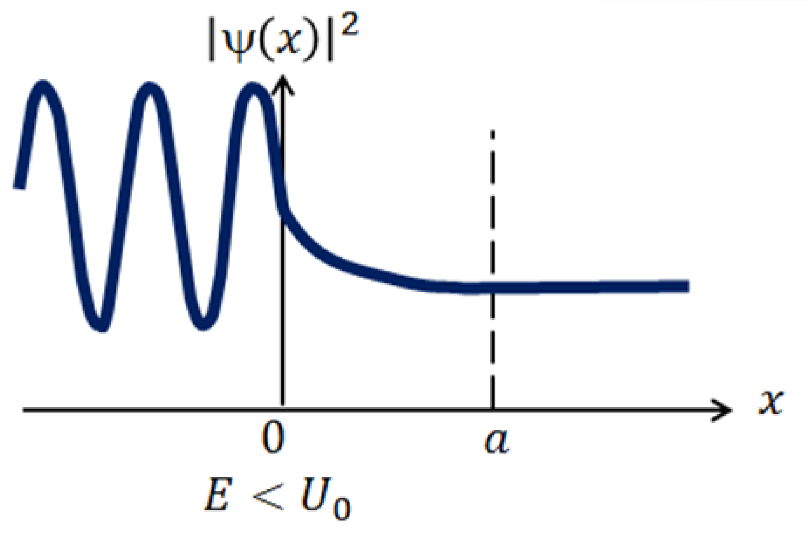


Классически: полное отражение, т.е. каждая частица, которая достигает барьера (x = 0), будет отскакивать обратно. Ни одна частица не может проникнуть через барьер, где она будет иметь отрицательную кинетическую энергию.

Квантово-Механические предсказания резко отличаются от их классических аналогов, поскольку волновая функция не равна нулю за барьером

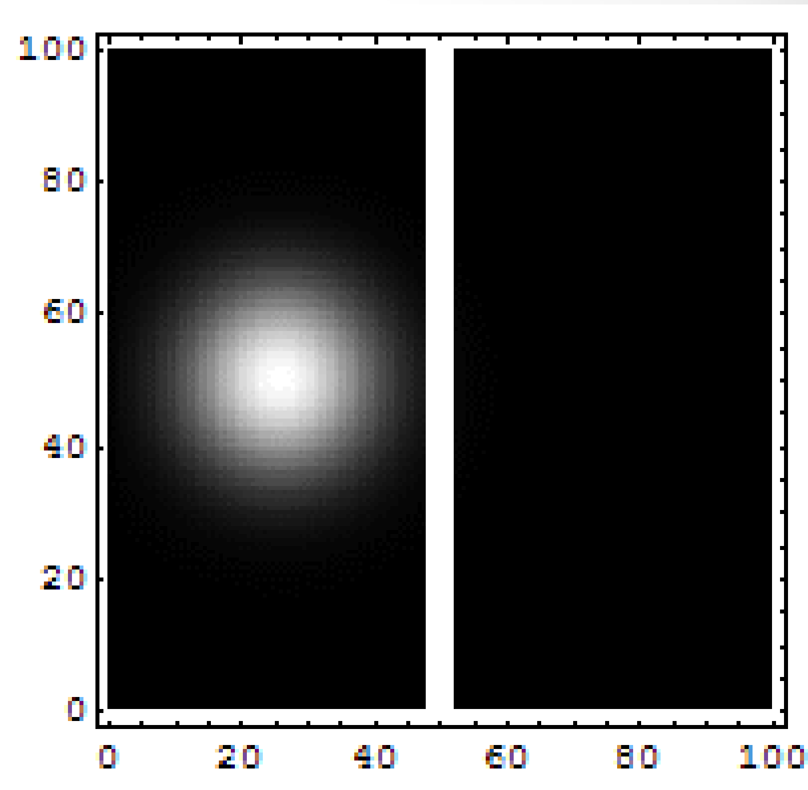
Туннельный эффект: квантовомеханические объекты могут туннелировать через классически непроницаемые барьеры!

Туннельный эффект имеет важное практическое значение - от физики элементарных частиц и ядерной физики до полупроводников: радиоактивные распады и перенос заряда в электронных устройствах.




Классическая
физика
Квантовая
физика

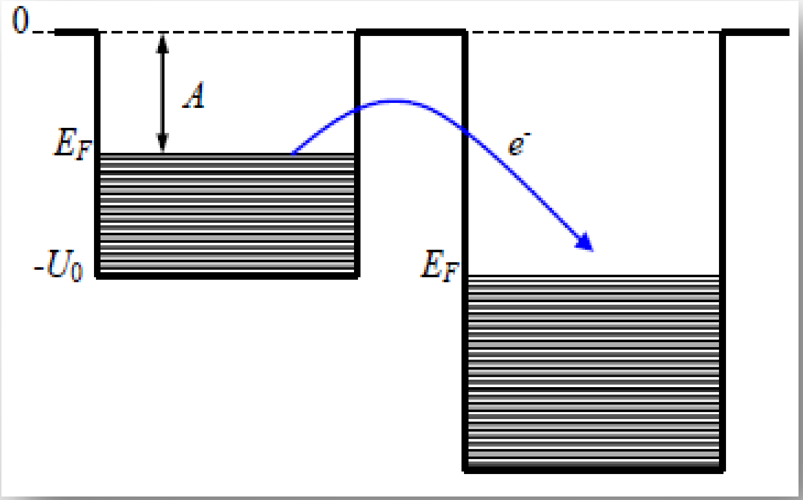

$U(x)$
$U(x)$
E
классически
запрещенная
область
x
0
x_1
x_2

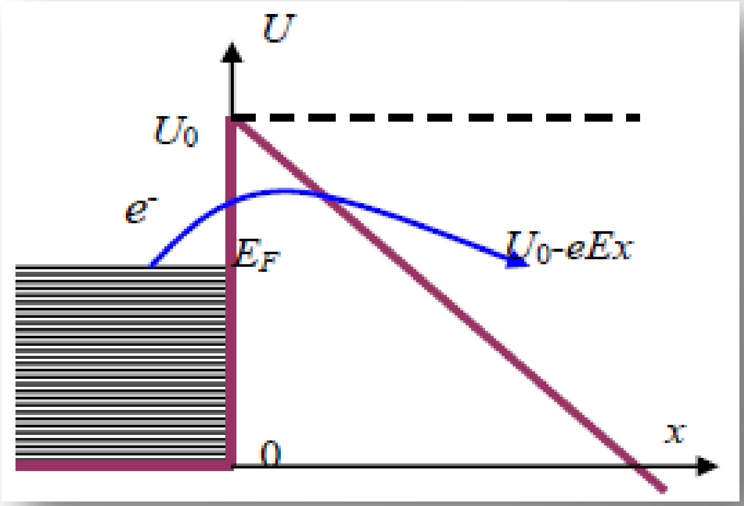

100
80
60
40
20
0
0
20
40
60
80
100

Применение туннельного эффекта

- ✓ Работа электронного микроскопа
- ✓ Контактная разность потенциалов
- ✓ Явление холодной эмиссии

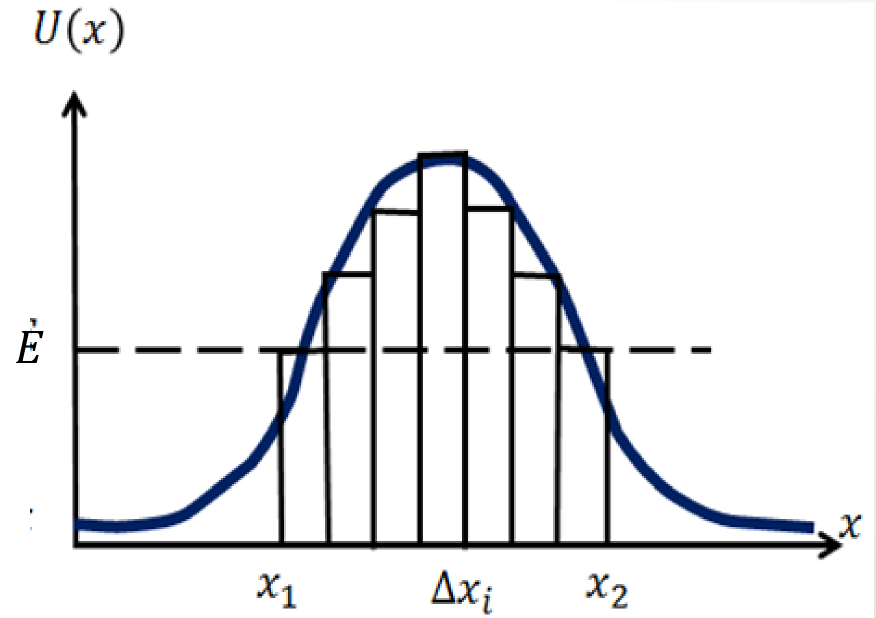
$$U(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ U_0 - eE_x & x > 0 \end{cases}$$





БАРЬЕР ПРОИЗВОЛЬНОЙ ФОРМЫ

$$T \simeq \exp\left\{-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2} dx\sqrt{2m\left(U_0 - E\right)}\right\}$$



Асимметричная квадратная яма

Движение частицы *m* ограничено внутри бесконечно глубокой асимметричной потенциальной ямы

Классически частица замкнута внутри ямы, периодически двигаясь с постоянным импульсом $\boldsymbol{p = \pm\sqrt{2mE}}$ в результате повторяющихся отражений от стенок ямы

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

Квантово механически: частица имеет связанные состояния и дискретный невырожденный энергетический спектр.
Так как $U(x)$ - бесконечный вне $0 \le x \le a$, поэтому волновая функция исчезает вне ямы.
Нужно искать решения только внутри ямы

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

$$k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$\psi(x)=A'e^{ikx}+B'e^{-ikx}$$

$$\Rightarrow\quad \psi(x)=A\sin(kx)+B\cos(kx)$$

Дискретность энергии

$$\psi(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx) \qquad \psi(0) = 0 \Rightarrow \qquad \mathbf{B = 0}$$

$$\psi(0) = \psi(a) = 0 \qquad \psi(a) = \sin(ka) = 0 \Rightarrow \quad k_n a = n\pi$$

$$\boxed{E_n = \frac{\hbar^2}{2m}k_n^2 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}n^2, \quad (n = 1, 2, 3, \cdots)}$$

последовательность дискретных энергетических уровней, с положительным целым значениям *n*.

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

энергия нулевых колебаний

Расстояние между соседними уровнями не константа:

$$E_{n+1} - E_n = 2n + 1$$

$$\frac{E_{n+1} - E_n}{E_n} = \frac{(n+1)^2 - n^2}{n^2} = \frac{2n+1}{n^2}$$

Состояния *n* = 2, 3, 4 … - возбужденные

$$\boxed{\boldsymbol{E_n = n^2 E_1}}$$

В классическом пределе

уровни становятся настолько близкими друг к другу, что их невозможно различить.

$$\boxed{\lim_{n\to\infty}\frac{E_{n+1} - E_n}{E_n} = \lim_{n\to\infty}\frac{2n+1}{n^2} = 0}$$

Связанность состояний

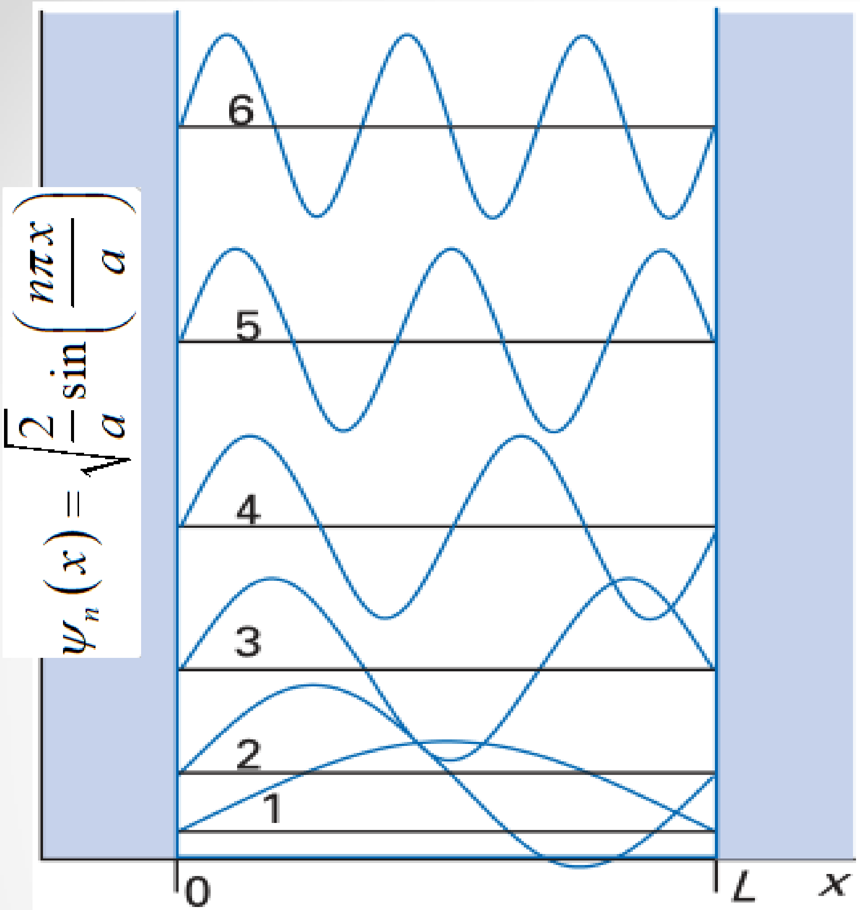
$$\psi_n(x) = A\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$

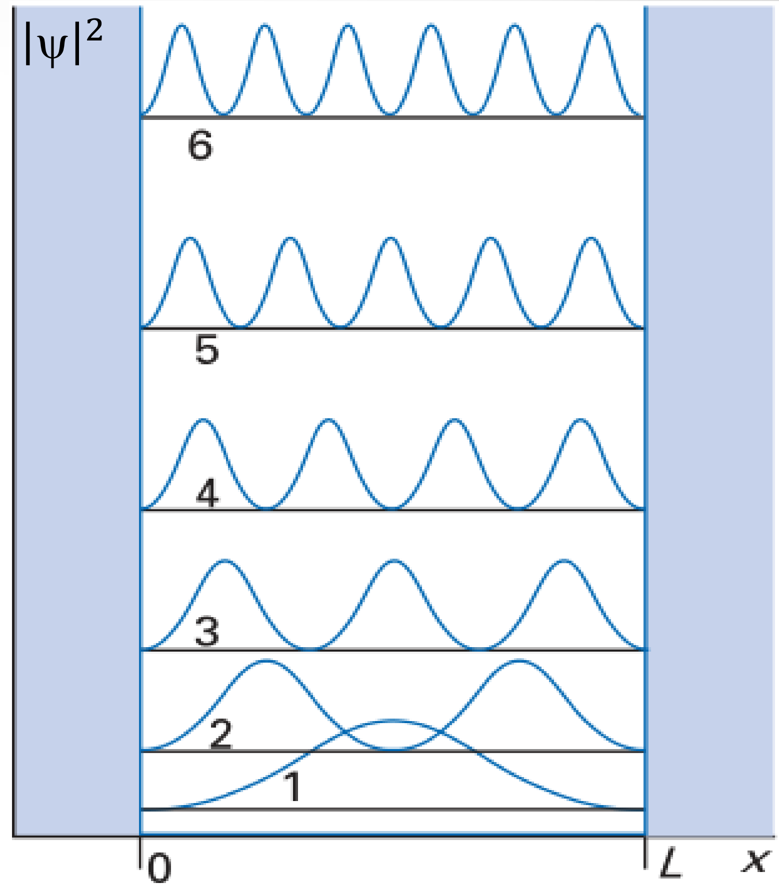
$$1 = \int_0^a |\psi_n(x)|^2\,dx = |A|^2 \int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right)dx \quad \Rightarrow \quad A = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

$$\boxed{E_n = \frac{\hbar^2}{2m}k_n^2 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}n^2}$$

$$\boxed{\begin{aligned}\Psi(x,t) &= \sum_{n=1}^{\infty}\psi_n(x)e^{-iE_nt/\hbar} \\ &= \sqrt{\frac{2}{a}}\sum_{n=1}^{\infty}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)e^{-in^2E_1t/\hbar}\end{aligned}}$$

1. ни один из энергетических уровней не является вырожденным (1 уровень - 1 собственная функция)
2. волновые функции различных уровней ортогональны





Первые 6 уровней и соответствующие волновые функции для частицы в бесконечно глубокой яме. (!)

- ✓ *Уровни шире отстоят друг от друга по мере увеличения энергии*
- ✓ *Максимальная амплитуда волновых функций одинакова*

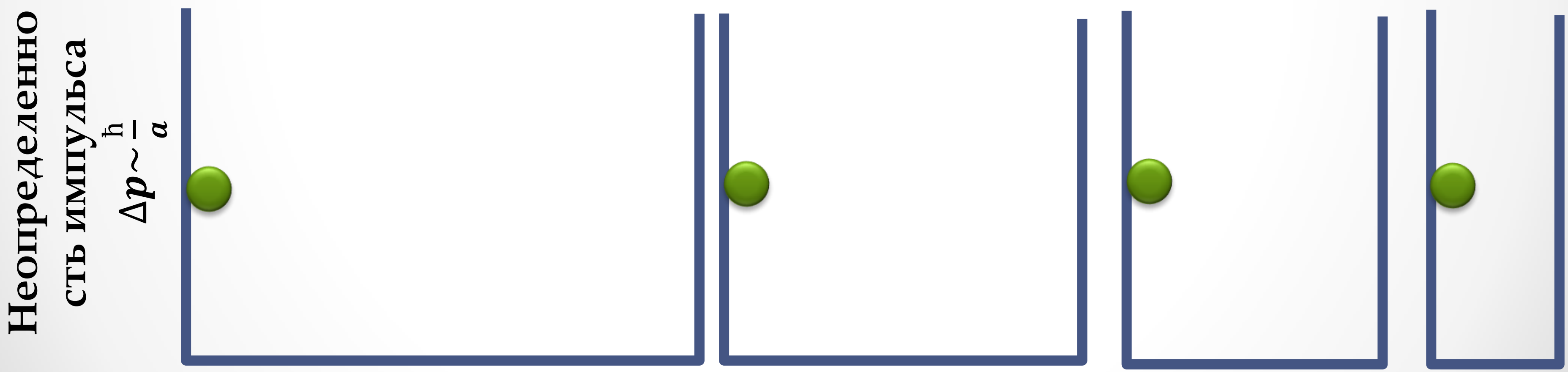
Распределение вероятности частицы в яме.
(!) распределение становится более равномерным по мере увеличения энергии

Энергия нулевых колебаний

Для потенциала квадратной ямы не существует состояния с нулевой энергией

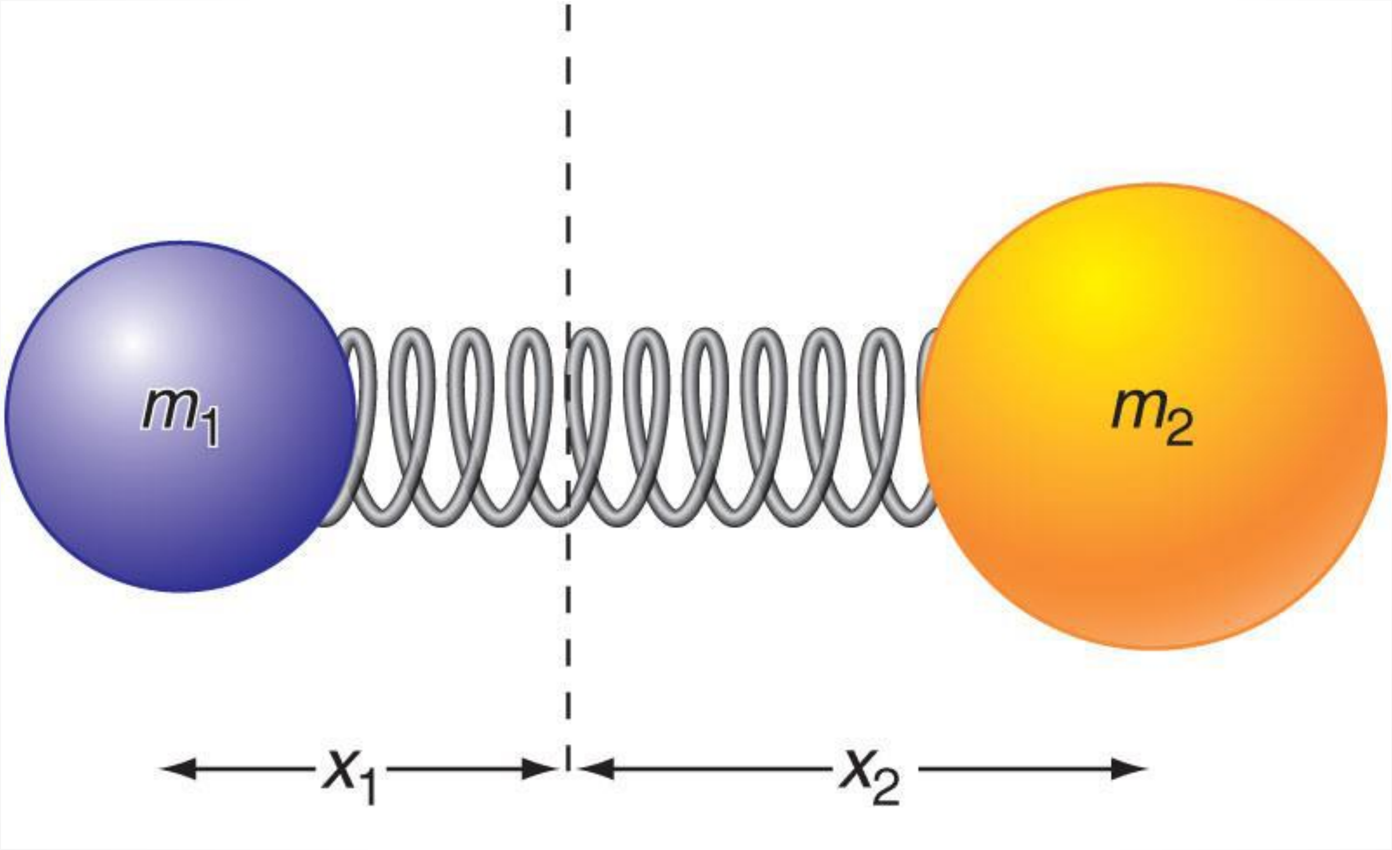
$$E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$$

Если $E = 0$, то частица находится в состоянии покоя в яме, это нарушение принцип неопределенностей. Локализация частицы в области $0 \le x \le a$, означает, что частица приобретает конечный импульс $\Delta p \sim \frac{\hbar}{a}$, и минимальную кинетическую энергию $\frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2ma^2}$.



ширина уменьшается , неопределенность импульса увеличивается. Это заставляет частицу двигаться быстрее, поэтому энергия нулевых колебаний также увеличивается. Энергия нулевых колебаний отражает необходимость минимального движения частицы.

Гармонический осциллятор



Гармонический осциллятор.

Одномерным гармоническим осциллятором = частица массой m совершающую одномерное движение под действием упругой силы $F = -kx$.

Потенциальная энергия такой частицы :

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

Собственная частота классического гармонического осциллятора

$$\omega = \sqrt{k/m} \Rightarrow k = m\omega^2$$

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

Стационарное уравнение Шредингера для осциллятора:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{m\omega^2x^2}{2}\psi=E\psi$$

Введем обозначения:

$$\xi=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\cdot x,\qquad \varepsilon=\frac{2E}{\hbar\omega}$$

$$\frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2}+\left(\varepsilon-\xi^2\right)\psi(\xi)=0$$

Решение будем искать в виде:

$$\psi(\xi)=v(\xi)\cdot e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

Подставляем в уравнение Шредингера:

$$\frac{d^2v(\xi)}{d\xi^2}-2\xi\frac{dv}{d\xi}+(\varepsilon-1)v(\xi)=0$$

Решение будем искать в виде ряда:

$$v(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^k$$

Подстановка в уравнение для $v(\xi)$ дает рекуррентную формулу для a_k:

$$a_{k+2} = \frac{2k+1-\varepsilon}{(k+1)(k+2)} a_k$$

Существуют два независимых решения, соответствующих четным и нечетным k.

1.При $k = 0$ рекуррентное соотношение позволяет последовательно выразить все a_k с четными k через a_0.

$$a_2 = \frac{1-\varepsilon}{2} a_0$$

2. При $k = 1$ рекуррентное соотношение позволяет последовательно выразить все a_k с нечетными k через a_1.

$$a_3 = \frac{3-\varepsilon}{6} a_1$$

Но при ξ→∞ функция $\psi\left(\xi\right)\approx e^{-\frac{\xi^2}{2}}$

Случай такой асимптотики физически недопустим, т.к. функция не является конечной при $x\to\infty$ ($\xi\to\infty$), не поддается нормировке, нормировочный интеграл оказывается бесконечным.

Чтобы получить физическое решение, необходимо, чтобы ряд содержал конечное число членов. Это возможно, если все коэффициенты a_k, начиная с некоторого $k = n$, обратятся в нуль, т.е.

$$a_{k+2}=\frac{2k+1-\varepsilon}{(k+1)(k+2)}a_k \quad \xrightarrow{\boldsymbol{k=n}} \quad 2n+1-\varepsilon=0$$

$$\boxed{\varepsilon=2n+1}$$

Подставляя в $$\varepsilon = \frac{2E}{\hbar\omega}$$

Получаем энергетический спектр одномерного гармонического осциллятора:

$$\boxed{E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, 3\dots.}$$

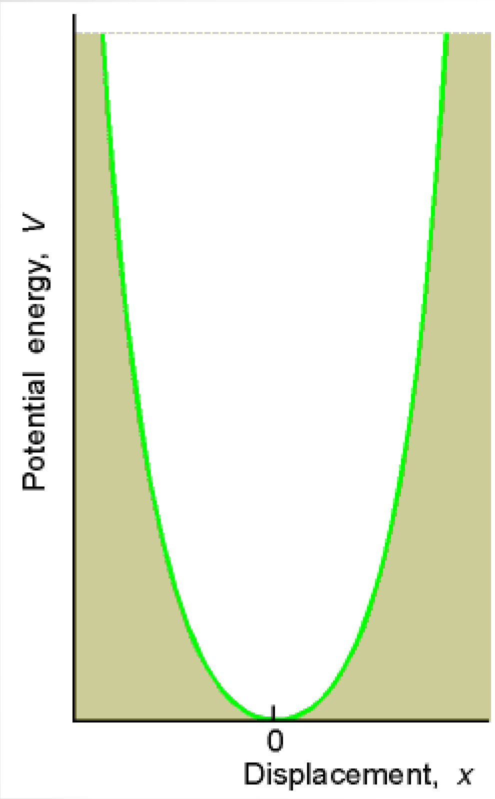
1. **Энергетический спектр является дискретным.**

2. **Уровни E_n эквидистантны, т.е. соседние уровни при любом n отстоят друг от друга на $\hbar\omega$.**

3. **Энергия квантового осциллятора не может обращаться в нуль, минимальная энергия (энергия основного состояния) равна $E_n = ½(\hbar\omega)$.**

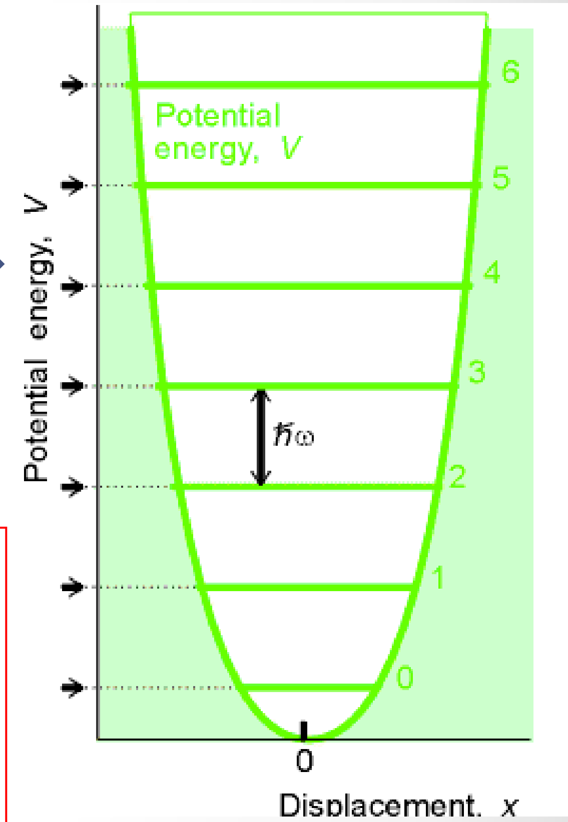
Стационарные состояния

Классическая механика



$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{kx^2}{2}\right]\psi = E\psi$$

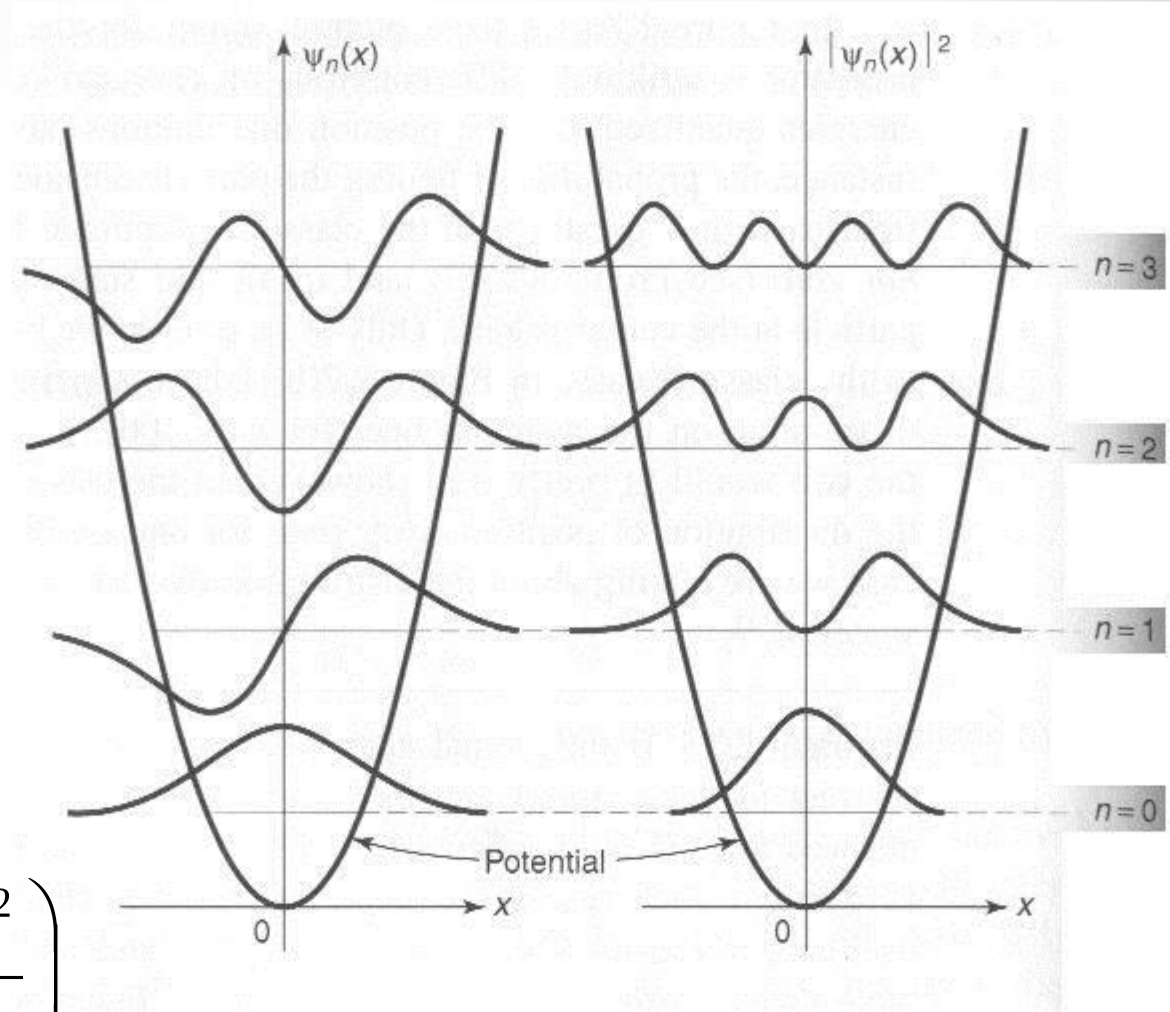
Квантовая механика



$$E_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \quad n = 0,1,2,\ldots$$

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

Разность энергий: constant = ħω



$$\psi_0(x) = exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right)$$

$$\boxed{E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, 3\ldots.}$$

$$\psi_1(x) = x\psi(x) = x\,exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right)$$