ЛЕКЦИЯ 4

Квантовая физика

Для описания эволюции системы, мы используем уравнение Шредингера

$$\hat{H}\psi = E\psi \Rightarrow (-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U)\psi = E\psi.$$

При решении такого уравнения получаются собственные значения оператора Гамильтона.

Мы рассмотрели проникновение частицы через барьер конечной ширины и научились решать уравнение Шредингера.

Мы выяснили, что волновая функция должна обладать следующими свойствами:

1. конечна — $W = |\psi|^2$, т. е. она должна убывать на бесконечности;
2. непрерывна — $\psi(a-\delta) = \psi(a+\delta)$;
3. гладкая — $\psi'(a-\delta) = \psi(a+\delta)$.

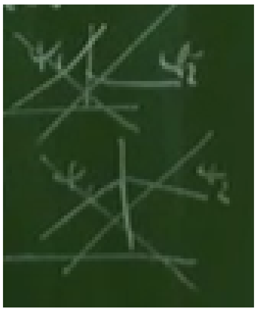

Рис. 4.1.

Теперь мы можем рассмотреть частицу в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками.

Запишем уравнение Шредингера:

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

$$U = 0 \quad \text{при } 0 < x < a,$$

$$\psi'' + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0,$$

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

$$\psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}.$$

Хочется сказать, что это бегущие волны налево и направо, но на самом деле это же стационарное состояние, ничего никуда не бежит. k — это не волновое число.

Теперь сделаем сшивку:

$$\psi|_{x=0,a} = 0 \Rightarrow \psi = A\sin(kx) + \underbrace{B\cos(kx)}_{0},$$

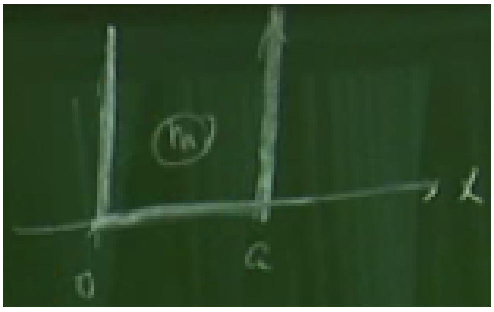

Рис. 4.2.

$$\psi = C\sin(kx).$$

В силу граничного условия получается:

$$ka = n\pi (k = \frac{2\pi}{\lambda},$$

$$2a = n\lambda.$$

Из-за граничных условий получается квантование.

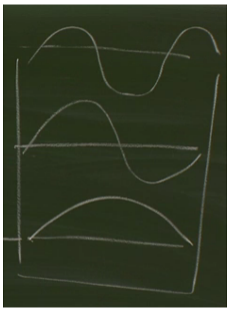

Рис. 4.3.

Но получается, что:

$$\psi(x = 0 - \delta) \neq \psi(x = 0 + \delta)$$

— это следствие того, что на самом деле не бывает бесконечно высоких стенок ямы. На самом деле стенки конечны и волновая функция экспоненциально затухает. Мы же определяем бесконечные стенки, как предел конечных.

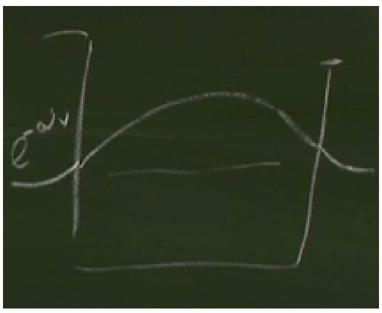

Рис. 4.4.

Но еще нужна нормировка:

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx = 1,$$

$$C^2 \int\limits_{-\infty}^{+\infty} (\sin^2 kxdx) = C^2 \int\limits_{0}^{a} (1 - \cos^2 kx) dx = \frac{C^2}{2k} ka = 1 \Rightarrow C = \sqrt{\frac{2}{a}}.$$

Тогда волновая функция:

$$\psi = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(kx)$$

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

Частица в яме может занимать фиксированные уровни энергии, которые пропорциональны n^2.

Чем больше число n, тем больше осцилляций ψ^2. Количество нулей — это $n - 1$. Это называется осцилляционная теорема.

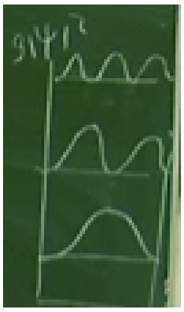

Рис. 4.5.

Если взять очень большое n, то число осцилляций большое, а значит распределение вероятности нахождения частицы практически одинаковые для разных положений. Переход к большим квантовым числам означает переход от квантовой физики к классической.

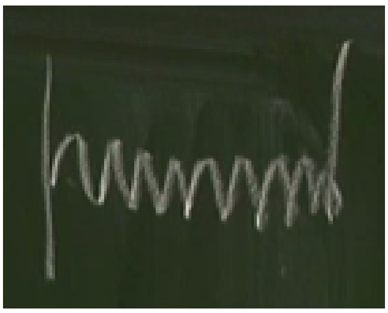

Рис. 4.6.

1. Важно понимать, что в стационарном состоянии k — это не волновое число. Состояние не зависит от времени. Если бы было движение туда-обратно, то это значит, что система обладала бы фиксированным импульсом, но в силу соотношения неопределенностей это не так.

2. **Дискретность энергии** — это прямое следствие граничных условий, того, что на стенках волновая функция равна нулю.
3. **Спектр возбуждения** — то есть какие энергии возможны у частицы. $E_n \propto n^2$.
4. $E(n=1) \neq 0 \to$ нулевая энергия. Она возникает из соотношения неопределенностей:
$$\Delta x \sim a$$
,
$$\Delta p_x \sim \hbar/a, \qquad \Delta E = \frac{(\Delta p)^2}{2m} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}.$$
Здесь важно понимать, что это средняя энергия.
5. Принцип соответствия Бора. При $n \to \infty \to$ Классическое описание.

Классический период:
$$T_{\text{кл}} = \frac{2a}{v} \Rightarrow \omega_{\text{кл}} = \frac{2\pi}{T} = \frac{\pi v}{a}$$

Переход из $(n+1)$-ого состояния в n-ое состояние связан с поглощением (испусканием) кванта: $\Delta E_n = \hbar\omega$
$$\hbar\omega = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}(n^2+2n+1-n^2) = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}(2n+1) = \frac{\pi\hbar}{a}\sqrt{\frac{2E_n}{m}}(1+\frac{1}{2n}),$$
$$n \to \infty \qquad \Rightarrow \qquad \hbar\omega = \frac{\pi\hbar v}{a}.$$

То есть мы получили решение одинаковое и для классики и для квантовой физики.

Посмотрим, что будет, если поле сферически симметричен, т. е. $U = U(r)$.
$$\hat{H}\psi = E\psi,$$
$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_r + U,$$
$$\Delta_r = \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}.$$
Замена переменных:
$$\psi = \frac{\xi}{r},$$
$$\frac{d\psi}{dr} = \frac{1}{r}\frac{d\xi}{dr} - \frac{\xi}{r^3},$$
$$\frac{d^2\psi}{dr^2} = \frac{1}{r}\frac{d^2\xi}{dr^2} \underbrace{-\frac{1}{r^2}\frac{d\xi}{dr} - \frac{1}{r^2}\frac{d\xi}{dr}}_{-\frac{1}{r^2}\frac{d\xi}{dr}} + \frac{2\xi}{r^3},$$
$$\Delta = \frac{1}{r}\frac{d^2\xi}{dr^2} - \frac{2}{r^2}\frac{d\xi}{dr} + \frac{2\xi}{r^3} + \frac{2}{r^2}\frac{d\xi}{dr} - \frac{2\xi}{r^2} = \frac{1}{r}\frac{d^2\xi}{dr^2},$$
$$\frac{1}{r}\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\xi}{dr^2} + (E-U) * \frac{\xi}{r} = 0,$$
$$\xi(0) = 0.$$

Получается, что движение в трехмерном сферически симметричном поле аналогично движению частицы в одномерной яме.

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\xi}{dr^2} + (E-U)\xi = 0.$$

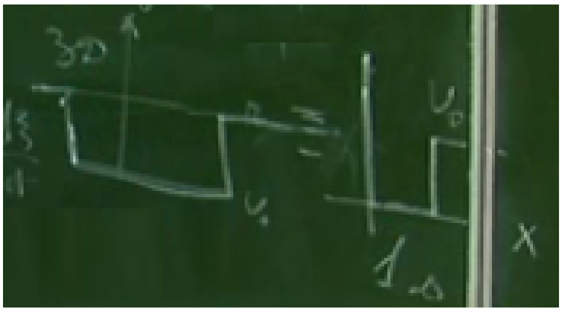

Рис. 4.7.

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

Рассмотрим решение.
В первой области $U=0$; во второй — $U=U_0$

$$\psi_1 = A\sin k_1 x, \qquad k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2},$$

$$\psi_2 = Be^{-k_2 x}$$

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

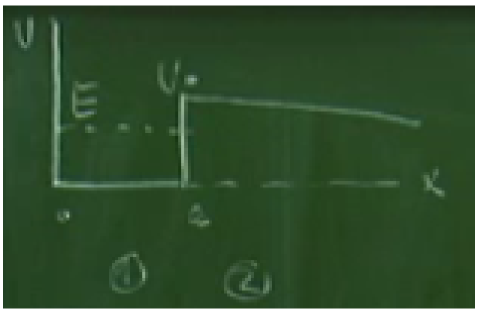

Рис. 4.8.

Сделаем сшивку:

$$\left.\begin{aligned}\psi_1(a) &= \psi_2(a),\\ \psi_1'(a) &= \psi_2'(a).\end{aligned}\right\}$$

$$\left.\begin{aligned}A\sin k_1 a &= Be^{-k_2 a},\\ k_1 A\cos k_1 a &= -k_2 Be^{-k_2 a}.\end{aligned}\right\}$$

$$\operatorname{tg} k_1 a = -\frac{k_1}{k_2} \Rightarrow k_1 a > \frac{\pi}{2}.$$

Для того, чтобы существовало стационарное состояние,должно выполняться такое условие:

$$k_1^2 a^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} a^2 \geqslant \frac{\pi^2}{4},$$

$$U_0 > E \geqslant \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2} \quad \text{— мощность ямы.}$$

Получается, несмотря на существование ямы, совсем необязательно, что частица будет там находиться. Если выполняется условие

$$U_0 a^2 \geqslant \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m},$$

то в яме есть стационарный уровень для частицы.

То есть яма должна быть достаточно глубокой и широкой

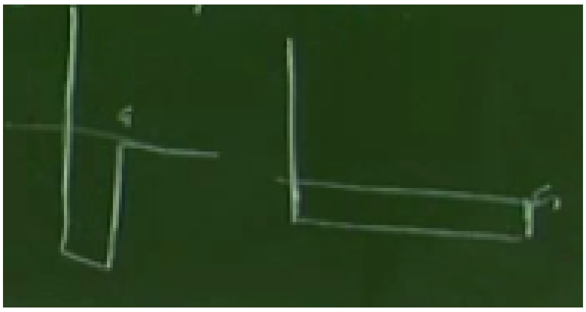

Рис. 4.9.

4.1. Одномерный случай

Пусть энергия частицы совсем немного меньше нуля, связь очень слабая:

$$E = -\varepsilon_0$$

Сразу обозначим условие для ямы:

$$\frac{2mU_0 a^2}{\hbar^2} \ll 1$$

В первой области может быть только так, потому что вне ямы — ноль:

$$\psi_1 = A \cos kx, \qquad k^2 = \frac{2mU_0}{\hbar^2},$$

$$E \ll U_0,$$

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

— здесь пренебрежем E.

$$k^2 a^2 = \frac{2mU_0 a^2}{\hbar^2} \ll 1$$

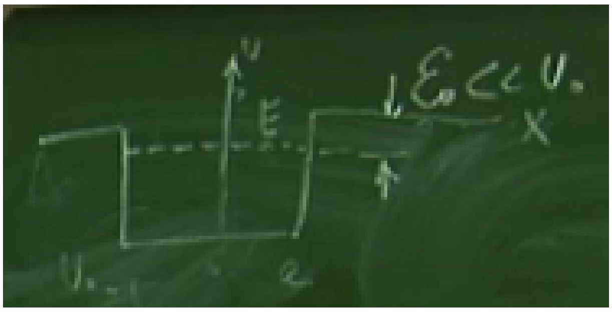

Рис. 4.10.

Это означает, что волновая функция почти постоянна:

$$\psi \approx \mathrm{const}(-a < x < a).$$

Теперь во второй области:

$$\psi_2'' - \frac{2m}{\hbar^2}(\varepsilon_0)\psi_2 = 0.$$

Понятно, что вне ямы волновая функция должна экспоненциально затухать, поскольку барьер конечный:

$$\psi_2 = e^{-\varkappa x}, \qquad \text{где } \varkappa^2 = \frac{2m\varepsilon_0}{\hbar^2}$$

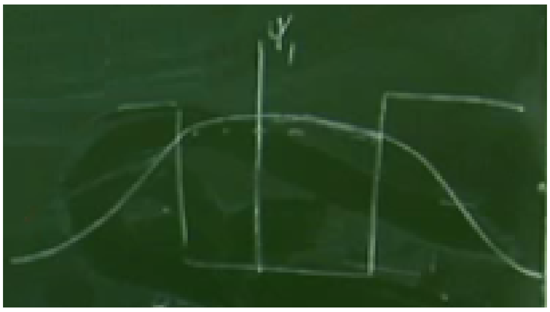

Рис. 4.11.

Теперь делаем сшивку:

$$\left.\begin{aligned} A\cos ka &= Be^{-\varkappa a}, \\ -kA\cos ka &= -\varkappa Be^{-\varkappa a}. \end{aligned}\right\}$$

$$\left.\begin{aligned} \cos ka &\simeq 1, \\ \sin ka &\simeq ka. \end{aligned}\right\}$$

$$k^2 a = \varkappa,$$

$$\frac{2m}{\hbar^2} = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}},$$

$$\varepsilon_0 = \frac{2mU_0^2a^2}{\hbar^2} = \left(\frac{2mU_0a^2}{\hbar^2}\right)U_0 \ll U_0.$$

Получается, что в одномерной потенциальной яме с конечными стенками, существует энергетический уровень связанного состояния. В двухмерном случае также. То есть если движение двумерное или одномерное, то оно квантуется и существуют стационарные уровни энергии.