ЛЕКЦИЯ 3

Квантовая физика

Длина волны де-Бройля
$$\lambda_{\text{дБ}} = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE}}.$$
Соотношение неопределенностей
$$\Delta x \Delta p_x \geqslant \hbar.$$

$$<\Delta x^2><\Delta p_x^2> \geqslant \frac{\hbar^2}{4}.$$
Соотношение неопределенностей работает только для сопряженных величин. Например $\Delta x \Delta p_y$ может быть равно нулю.

Нильс Бор показал, что для энергий тоже есть соотношение неопределенностей:
$$E = \frac{p^2}{2m}, \qquad \Delta E = \frac{\Delta p}{m}p = \frac{\Delta x}{\Delta t}\Delta p \sim \hbar,$$
$$\Delta E \Delta t \sim \hbar.$$
Время — это не переменная, а параметр.

Если система живет какое-то конечное время τ (например возбужденный атом):
$$\Delta E \Delta t \sim \hbar \to \Delta E \Delta \tau \sim \hbar.$$
Второе — это то, что нельзя точно проверить закон сохранения энергии.

Каждой физической величине f мы ставили в соответствие оператор:
$$<f> = int \psi^* \hat{f} \psi dr, \qquad \hat{x} = x \Rightarrow \hat{U}(x) = U(x), \qquad \hat{f}(x) = f(x).$$
— операторы функций от координаты. Оператор импульса
$$\hat{p} = -i\hbar\nabla.$$

$$T = \frac{p^2}{2m} \Rightarrow \hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = \frac{1}{2m}(-i\hbar\nabla)^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$$
Найдем результат применения операции $\frac{d^2}{dx^2}x^2$ к функции $\cos x$:
$$\frac{d^2}{dx^2}x^2\cos x = \frac{d}{dx}\left(\frac{d}{dx}x^2\cos x\right) = \frac{d}{dx}\left(2x\cos x - x^2\sin x\right) =$$
$$= 2\cos x - 2x\sin x - 2x\sin x - x^2\cos x = (2-x)^2\cos x - 4x\sin x.$$
То есть оператор — это то, что нужно делать с функцией, на которую он воздействует.

Квадрат волновой функции показывает вероятность нахождения частицы в данном месте пространства.

Для волновой функции Шредингер написал волновое уравнение. Рассмотрим, как получить его для свободной частицы с импульсом p.

$$\psi = \mathrm{e}^{i(kx-\omega t)} = \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)},$$

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left(-\frac{iE}{\hbar}\right)\psi,$$

$$\frac{\partial\psi}{\partial x} = \left(\frac{i}{\hbar}p\right)\psi,$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2}\psi \to \psi = -\frac{\hbar^2}{p^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}.$$

Теперь подставим эту волновую функцию в уравнение

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left(-\frac{iE}{\hbar}\right)\psi,$$

$$\frac{i}{\hbar}\frac{\partial\psi}{\partial t} = -E\frac{\hbar^2}{p^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi = -\hat{T}\psi$$

Получается уравнение Шредингера для свободной частицы:

$$-\frac{i}{\hbar}\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{T}\psi \Rightarrow -\frac{i}{\hbar}\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{T} + \hat{U}\psi = \hat{H}\psi$$

— **нестационарное уравнение Шредингера**, описывающее систему.

Но мы будем иметь дело со стационарными системами, поэтому нужно стационарное уравнение Шредингера. Стационарное состояние характеризуется только энергией. Это значит

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = 0,$$

$$\Psi(r,t) = \psi(r) * f(t).$$

Представим функцию в таком виде

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = i\hbar\frac{\partial f}{\partial t}\psi = f(t)\hat{H}(r)\psi(r),$$

$$i\hbar\frac{\partial f}{\partial t}\psi = i\hbar\frac{1}{f}\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{1}{\psi}\hat{H}\psi = \mathrm{const} = E.$$

$\hat{H}\psi = E\psi$ — уравнение Шредингера для стационарных состояний или нахождение собственных значений оператора Гамильтона.

$$i\hbar\frac{\partial f}{\partial t} = Ef \Rightarrow f(t) = \mathrm{const} * \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}Et}.$$

Из соотношения де-Бройля следует, что эта константа и есть энергия.

Решим задачу о нахождении стационарного состояния. Рассеяние на потенциальной ступеньке. Как будет вести себя частица, прилетающая к потенциалу величиной U_0. Начальная энергия частицы E.

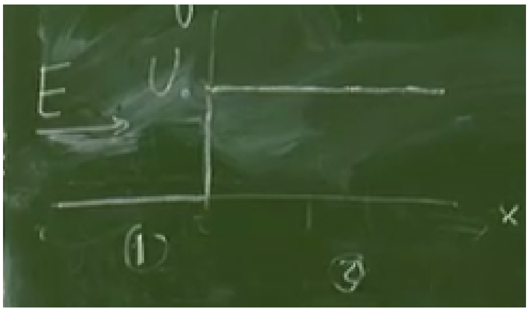

Рис. 3.1.

Потенциал задается следующим образом:

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

Для первой области:

$$\hat{H}\psi_1 = E\psi_1, \qquad (-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + U)\psi = E\psi,$$

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi_1 = 0,$$

$$\psi_1 = 1 * \mathrm{e}^{ik_1x} + A\,\mathrm{e}^{-ik_1x},$$

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

Для второй области:

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E)\psi_2 = 0,$$

$$\psi_2 = B\,\mathrm{e}^{-ik_2x} + \underbrace{\mathrm{e}^{ik_1x}}_{0},$$

поскольку на бесконечности волновая функция должна стремиться к нулю.

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

Но функция должна быть единая, для области 1 и области 2.

Нужно добавить физические условия:

1. Конечность

$$\psi(\pm\infty) = 0.$$

2. ψ — непрерывна.
   Пусть есть разрыв, тогда в какой-то точке вероятность будет разной, что невозможно.
3. ψ — гладкая, т. е. $\frac{\partial\psi}{\partial x}$ — непрерывна.
   Пусть есть скачок в производной. Рассмотрим δ-окрестность.

$$\psi'(0-\delta) - \psi'(0+\delta) = \int\limits_{0-\delta}^{0+\delta} \underbrace{(U - E')}_{\Delta}\psi dx = \Delta\psi * \underbrace{2\delta}_{\to 0} \Rightarrow 0.$$

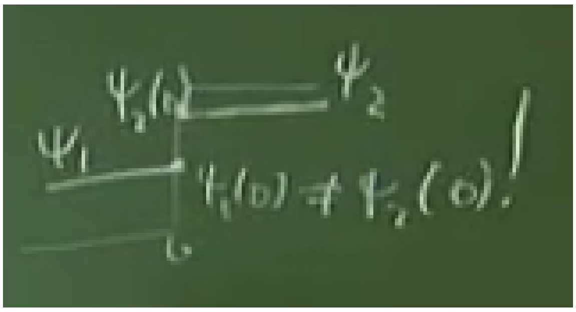

Рис. 3.2.

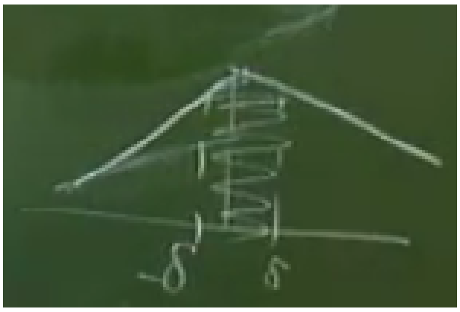

Рис. 3.3.

Произведем сшивку волновых функций (сшить решение), т. е. сделать так, чтобы волновая функция удовлетворяла приведенным выше условиям.

$$\left.\begin{aligned} 1)\psi_1(0) = \psi_2(0),\\ 2)\psi_1'(0) = \psi_2'(0).\end{aligned}\right\}$$

$$\left.\begin{aligned} A + 1 = B,\\ ik_1(1 - A) = -k_2 B.\end{aligned}\right\}$$

$$A = \frac{1 - ik_2/k_1}{1 + ik2/k1},$$

$$B = \frac{2}{1 + ik2/k1}.$$

То есть мы нашли решение уравнения Шредингера.

Теперь рассмотри второй случай, когда энергия частицы больше барьера (надбарьерное рассеяние частицы).

Сразу напишем общий вид волновых функций для обеих областей:

$$\psi_1 = \mathrm{e}^{ik_1x} + A\,\mathrm{e}^{-ik_1x},$$

$$\psi_2 = B\,\mathrm{e}^{-ik_2x}.$$

Сшивка:

$$\left.\begin{aligned} A + 1 = B,\\ ik_1(1 - A) = ik_2 B.\end{aligned}\right\}$$

$$(k_1 - k_2)(B - 1) = k_2 B,$$

$$B = \frac{2k_1}{k_1 + k_2},$$
$$A = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}.$$

То есть получается, что несмотря на то, что энергия частицы больше, существует вероятность отражения ее от барьера.

Нужно определить вероятность того, что частица, обладающая энергией больше, чем барьер, пройдет через него.

Для этого используют коэффициент прохождения. Но скорости слева и справа — разные. Поток должен быть непрерывен.

$$D = \frac{j_2}{j_1},$$

$$j = \rho * v = |\psi|^2 \sqrt{\frac{2E}{m}},$$
$$j_1 = |\psi_1|^2 \sqrt{\frac{2E}{m}},$$
$$j_2 = |\psi_2|^2 \sqrt{\frac{2E - U}{m}}.$$

Но поскольку

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = k_1^2,$$
$$j_1 = |\psi_1|^2 \sqrt{\frac{2E}{m}} = 1 * k_1 \hbar / m,$$
$$j_2 = |\psi_2|^2 \sqrt{\frac{2E - U}{m}} = B^2 * k_2 \hbar / m.$$

Тогда можно переписать выражение:

$$D = \frac{j_2}{j_1} = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}.$$

Если обратить движение частицы, то ничего не изменится, т. к. уравнения Шредингера одинаковые. Вероятность прохождения частицы через барьер слева и справа — одинаковые.

Теперь рассмотрим, что будет, если барьер конечной ширины. Энергия частицы меньше, чем величина барьера.

$$\psi_1 = 1 * \mathrm{e}^{i/\hbar\sqrt{2mE}x} + A * \mathrm{e}^{-i/\hbar\sqrt{2mE}x},$$

$$\psi_3 = \alpha * \mathrm{e}^{i/\hbar\sqrt{2mE}x},$$
$$\psi_2 = B * \mathrm{e}^{-1/\hbar\sqrt{2m(U-E)}x}.$$

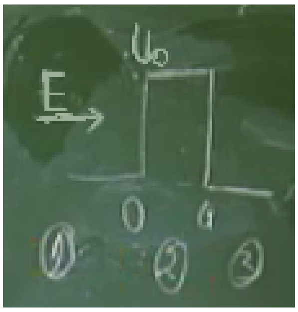

Рис. 3.4.

По-хорошему, мы должны были рассмотреть все волны, которые переотражаются в барьере. Но если величина энергии частицы отлична от высоты барьера, то вклад этих волн пренебрежимо мал.

$$D = \frac{j_2}{j_1} = \frac{|\psi_3|^2}{|\psi_1|^2} = \alpha^2 \approx |\psi_2|^2(a) = \exp\left[-2/\hbar\sqrt{2m(U-E)}a\right].$$

Теперь, пусть у нас есть барьер какой-то хитрой формы.

Тут тоже будет прохождение частицы через барьер, но коэффициент записывается с помощью интеграла:

$$\exp\left[-2/\hbar\int\limits_a^b\sqrt{2\mu(U-E)}dx\right].$$

Здесь

$$\mu$$

— это приведенная масса, т. к. масса барьера может быть сравнима с массой частицы.

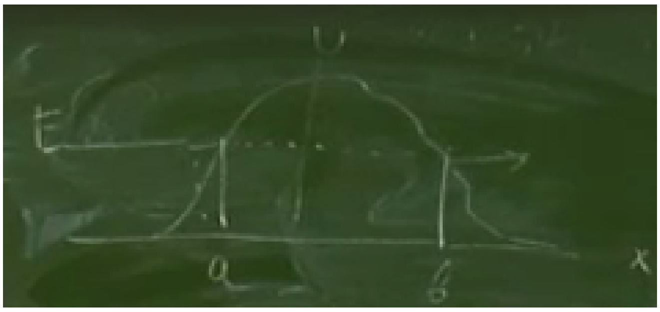

Рис. 3.5.

Когда такой эффект обнаружили на бумаге, то считали, что это только математический фокус, а на самом деле проникновения нет. Но в 1927 году русский физик Гамов обнаружил, что альфа-частица может туннелировать.

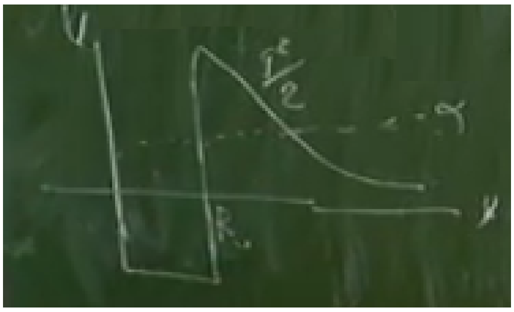

Рис. 3.6.

Интересно, что если частица находится под барьером, то ее кинетическая энергия при этом должна быть отрицательной. Но если мы попытаемся локализовать частицу в этой области, то сразу возникнет такой Δp, что энергия частицы окажется над барьером.