

УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА ДЛЯ СТАЦИОНАРНЫХ СОСТОЯНИЙ

Решение временного уравнения Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, y, z, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(x, y, z, t) + U(x, y, z, t) \Psi(x, y, z, t),$$

в том случае, когда силовое поле стационарно, то есть не изменяется с течением времени,

$$U = U(x, y, z),$$

можно представить в виде произведения двух функций

$$\Psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z) \cdot \exp(-itE/\hbar),$$

где E - полная энергия частицы.

Подстановка во временное уравнение Шредингера сводит его к виду, не зависящему от времени

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

Уравнение такого вида называется уравнением Шредингера для стационарных состояний.

Построим решение уравнения Шредингера стационарных состояний для некоторых задач, имеющих принципиальное значение.

Движение свободной частицы

Пусть свободная частица движется вдоль оси x , обладая импульсом p_x . Свободная – значит невзаимодействующая, поэтому потенциальная энергия частицы равна нулю, а полная энергия равняется кинетической.

Запишем уравнение Шредингера для такой частицы

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi = 0.$$

Волновая функция вида

$$\psi(x) = A \cdot \exp(ikx),$$

обращает уравнение Шредингера в тождество, если

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

Дополнив волновую функцию множителем $\exp(-i\omega t)$, получаем, что решение временного уравнения Шредингера представляет собой плоскую монохроматическую волну де Бройля

$$\Psi(x, y, z, t) = A \cdot \exp(-i(\omega t - kx)).$$

Волновое число k определяет кинетическую энергию и импульс частицы

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

Энергия, импульс и волновое число могут принимать любые значения, а, следовательно, имеют непрерывный спектр. Решение соответствует классической нерелятивистской свободной частице.

Плотность вероятности не зависит от времени

$$|\Psi|^2 = \Psi \cdot \bar{\Psi} = A^2,$$

и одинакова в любой области пространства.

Частица в одномерной бесконечно глубокой потенциальной яме

Потенциальная яма – область пространства, в которой существует локальный минимум потенциальной энергии. Такая модель пригодна для описания многих физических ситуаций. Например: электрон в атоме Бора, электроны проводимости в металлах.

Наиболее просто выглядит одномерная потенциальная яма прямоугольной формы. Потенциальная энергия частицы всюду, кроме отрезка $0 < x < L$, равна нулю, а на нем ее значение $-U_0$. На рисунке ось абсцисс – это пространственная координата x , а ось ординат – потенциальная энергия частицы.

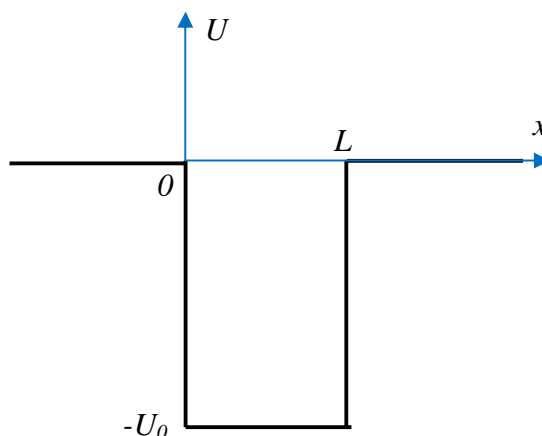


Рисунок 1

Пусть для энергии микрочастицы, находящейся в потенциальной яме, справедливо $E \sim U_0$. Частица находится вблизи дна ямы. Тогда яму можно считать бесконечно глубокой. Энергию в этом случае удобно отсчитывать от дна ямы, а на стенках считать бесконечной. Одномерная бесконечно глубокая потенциальная яма показана на рисунке. Решение уравнения Шредингера для такой потенциальной ямы оказывается достаточно простым.

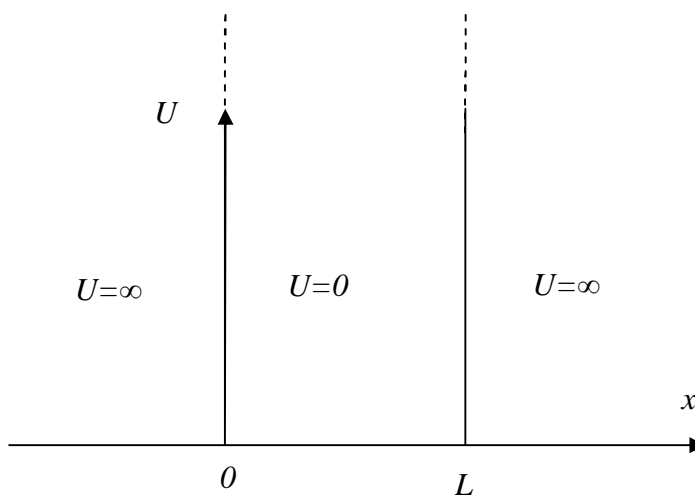


Рисунок 2

Запишем выражение для потенциальной энергии сформулированной задачи

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

Бесконечно большая энергия за пределами ямы делает невозможным обнаружение микрочастицы в этой области. Волновая функция $\psi(x \leq 0) = 0$ и $\psi(x \geq L) = 0$. Поскольку волновая функция должна быть непрерывной, то граничное условие для волновой функции в яме следует записать в виде

$$\psi(0) = 0, \text{ и } \psi(L) = 0.$$

Уравнение стационарных состояний Шредингера внутри ямы принимает вид

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + k^2 \psi = 0, \text{ где } k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E.$$

Волновая функция в виде гармонических функций

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

является решением уравнения Шредингера. Сформулированные условия на стенках ямы позволяют определить константы A и B .

Из условия $\psi(0) = 0$ следует, что $B = 0$. На правой стенке условие $\psi(L) = 0$ будет выполнено, если

$$kL = \pi n, \text{ где } n = 1, 2, \dots$$

Тогда, для энергии справедливо

$$E = k^2 \frac{\hbar^2}{2m} = \frac{(\pi n \hbar)^2}{2mL^2}, \quad n = 1, 2, \dots$$

Таким образом, спектр энергии микрочастицы, находящейся в одномерной бесконечно глубокой потенциальной яме, дискретен.

Номер энергетического уровня n называется главным квантовым числом. Нумерация энергетических уровней начинается с единицы. Значение $n = 0$ обнуляет волновую функцию, что соответствует отсутствию частицы в яме.

При переходе из одного стационарного состояния в другое выделяется или поглощается порция энергии

$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = \frac{(\pi \hbar)^2}{2mL^2} (2n + 1).$$

При больших значениях квантового числа $n \gg 1$ энергетические уровни сближаются, становятся квазинепрерывными

$$\frac{\Delta E}{E} = \frac{2n + 1}{n^2} \approx \frac{2}{n}$$

Сделаем оценку для различных физических ситуаций. Пусть электрон, $m \approx 10^{-31} \text{ кг}$, находится в потенциальной яме. Если потенциальная яма моделирует атом водорода, то $L \approx 10^{-10} \text{ м}$, а $\Delta E \approx 10^2 n$ [эВ]. Спектр в этом случае дискретен. Если потенциальная яма моделирует свободные электроны в металле, то $L \approx 10 \text{ см}$, а $\Delta E \approx 10^{-16} n$ [эВ]. Такой спектр, формально оставаясь дискретным, фактически таковым не является. Разделить близлежащие энергетические уровни фактически невозможно. Электрон можно описать в рамках классической механики.

Проделанная оценка иллюстрирует общий физический принцип, согласно которому при больших значениях квантового числа квантовая механика переходит в механику классическую. Данный принцип называется принципом соответствия Бора.

Учитывая дискретность спектра, запишем волновую функцию n -го энергетического уровня

$$\psi_n(x) = A \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right), \quad n = 1, 2, \dots$$

Условие нормировки сформулируем следующим образом: вероятность обнаружения частицы в яме, если она там есть, равняется единице. Тогда, интегрируя

$$\int_0^L \psi_n(x) \cdot \overline{\psi_n(x)} dx = A^2 \int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right) dx = 1,$$

получаем, что $A = \sqrt{2/L}$.

Окончательно получаем, что волновая функция имеет вид

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right).$$

Поведение волновых функций и плотности вероятности для первых главных квантовых чисел представлено на рисунке

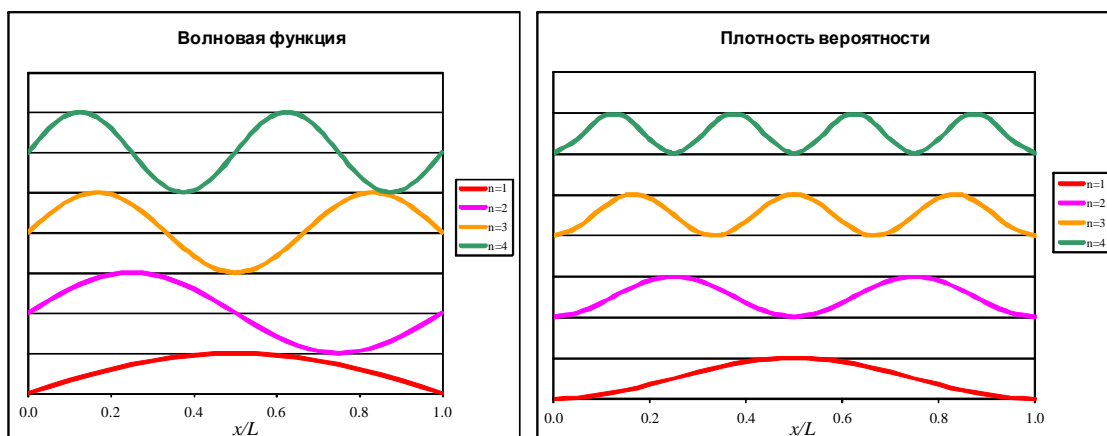


Рисунок 3

Гармонический осциллятор

Линейный одномерный гармонический осциллятор - это система, совершающая относительно точки равновесия гармонические колебания вдоль одного направления под действием квазиупругой силы.

В физике модель гармонического осциллятора играет важную роль, особенно при исследовании малых колебаний систем около положения устойчивого равновесия. Примером таких колебаний в квантовой механике являются колебания атомов в твердых телах, молекулах и т.д.

Если на материальную точку действует квазиупругая сила $F = -kx$, то колебания осуществляются на собственной частоте $\omega^2 = k/m$. Параболический профиль потенциальной энергии осциллятора $U = kx^2/2$ приведен на рисунке.

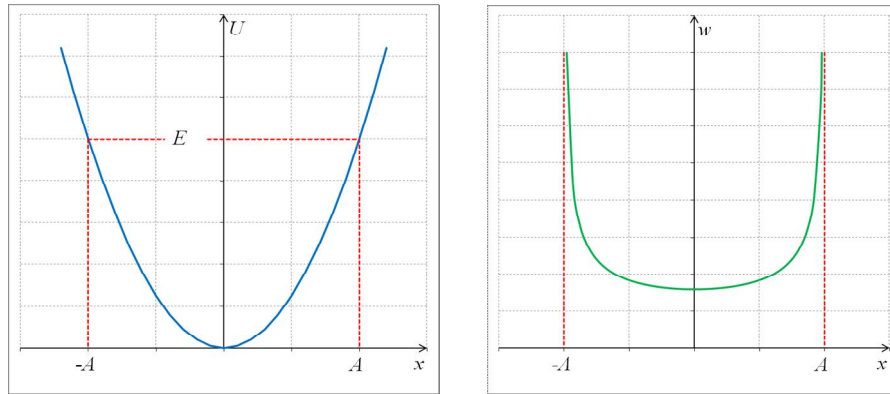


Рисунок 4

Классический осциллятор совершает движения на отрезке $(-A, A)$. Полная энергия осциллятора остается постоянной и равной $kA^2/2$. В точках поворота $x = \pm A$ кинетическая энергия равна нулю, а потенциальная энергия - полной

$$E = T + U = \frac{p^2}{2m} + \frac{kx^2}{2} = \frac{kA^2}{2}.$$

Минимальное значение полной энергии классического осциллятора равно нулю. Этот случай соответствует частице, покоящейся в положении равновесия.

Вероятность $w(x)dx$ обнаружить осциллятор в интервале от x до $x+dx$ пропорциональна времени прохождения осциллятором этого интервала. Если $\tau = 2\pi/\omega$ - период колебаний, то

$$w(x)dx = \frac{dt}{T} = \frac{\omega dx}{2\pi V}.$$

Пусть $x = A \sin \omega t$, тогда скорость $V = A\omega \cos \omega t = A\omega \sqrt{1 - (x/A)^2}$, и, следовательно,

$$w(x)dx = \frac{1}{2\pi A} \frac{dx}{\sqrt{1 - (x/A)^2}}.$$

Рассчитанная вероятность нахождения классического осциллятора приведена на рисунке. Как видно из рисунка, в положении равновесия вероятность минимальна, а вблизи точек поворота вероятность существенно возрастает.

Поведение квантового осциллятора существенно иное. Первоначально сделаем оценки. Запишем соотношение неопределенности для квантового осциллятора $2xp \geq h$.

Тогда $x \geq h/(2p)$, а для полной энергии осциллятора получаем

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \geq \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 h^2}{8p^2}.$$

Полная энергия как функция импульса имеет экстремум (минимум). Находя его,

$$\frac{dE}{dp} = \frac{p}{m} - \frac{m\omega^2 h^2}{4p^3} = 0$$

получаем, что

$$p_{\min}^2 = \frac{m\omega h}{2}, \text{ а } E_{\min} \geq \frac{\omega h}{2}.$$

Минимальное значение энергии квантового осциллятора отлично от нуля, она называется нулевой энергией. Эта энергия, которую нельзя забрать у осциллятора. Эксперименты подтвердили наличие у квантовых систем нулевой энергии и нулевых колебаний.

Построим точные решения для квантового осциллятора, базирясь на уравнении Шредингера. Для осциллятора оно имеет вид

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{k}{2} x^2 \right) \psi = 0.$$

Переходя к безразмерным переменным

$$\xi = x \sqrt{\frac{k}{\hbar \omega}} = \frac{x}{x_0}, \text{ где } x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m \omega}} \text{ и } \lambda = \frac{2E}{\hbar \omega},$$

преобразуем уравнение к виду

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial \xi^2} + (\lambda - \xi^2) \psi = 0.$$

Волновые функции, являющиеся решением этого дифференциального уравнения, будут однозначными, непрерывными и конечными не при любых значениях параметра λ , а лишь если

$$\lambda = 2n + 1, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Параметр λ определяет полную энергию квантового осциллятора. Следовательно, энергетический спектр квантового осциллятора дискретен

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

Номер квантового уровня n называется главным квантовым числом.

Энергия нулевых колебаний $E_0 = \hbar \omega / 2$ - минимальная энергия осциллятора совпала с оценкой, полученной с использованием соотношения неопределенности.

Точный расчет квантового электрического осциллятора (диполя), выходящий за рамки данного курса, показывает, что особенности испускания и поглощения фотона осциллятором таковы, что возможны переходы только между соседними уровнями, (правило отбора) при этом $\Delta n = \pm 1$. Энергия излученного фотона

$$E_{n+1} - E_n = \hbar \omega \left(n + 1 + \frac{1}{2} \right) - \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) = \hbar \omega.$$

Энергетические уровни равноотстоят друг от друга. Находясь в стационарном состоянии, квантовый осциллятор не излучает фотонов.

Приведем волновые функции, выраженные через полиномы специального вида

$$\psi_n(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi} x_0}} \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) H_n(\xi).$$

Полиномы для первых трех главных квантовых чисел

$$H_0(\xi) = 1, \quad H_1(\xi) = 2\xi, \quad H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2.$$

Убедиться в том, что построенные волновые функции являются решениями уравнения Шредингера в безразмерном виде, можно непосредственной подстановкой.

Энергетический уровень, волновая функция и плотность вероятности квантового осциллятора для первых четырех главных квантовых чисел приведены на рисунке.

Поведение квантового осциллятора существенно отличается от поведения классического. При нечетных значениях главного квантового числа вероятность обнаружения частицы в центре ямы равна нулю. Микрочастица может находиться и в правой части ямы и в левой, переходить из одной части в другую, но при этом никогда не находится в центре ямы.

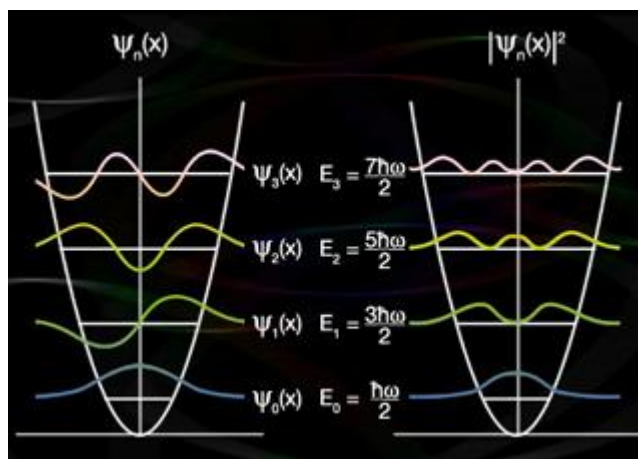


Рисунок 5

Как видно из рисунка, волновые функции квантового осциллятора выходят за пределы потенциальной ямы. Это означает, что у квантового осциллятора есть ненулевая вероятность попасть в область, запрещенную классической механикой.

***Взаимодействие микрочастицы с потенциальным барьером.
Туннельный эффект.***

Потенциальный барьер — область пространства, в которой существует локальный максимум потенциальной энергии. Рассмотрим простейшую одномерную задачу. Пусть потенциальная энергия определяется функцией $U(x)$, отличной от нуля лишь вблизи начала координат. В начале координат потенциальная энергия достигает локального максимума $U(0) = U_0$.

Классическая частица, обладающая энергией $E < U_0$, движется вдоль оси x из $-\infty$ в $+\infty$. Запишем полную энергию частицы как сумму кинетической и потенциальной энергий

$$E = \frac{p^2}{2m} + U(x).$$

Тогда импульс

$$p(x) = \sqrt{2m(E - U(x))}.$$

Изначально $p(\infty) > 0$. По мере движения импульс уменьшается. В некоторой точке x_s , назовем ее точкой поворота, вся энергия перейдет в потенциальную $E = U(x_s)$. Частица остановится, поскольку при этом $p(x_s) = 0$, а затем движение начнется в обратном направлении с импульсом $p(x) < 0$.

Классическая частица, находящаяся с одной стороны от потенциального барьера и обладающая энергией меньшей, чем высота барьера, никогда не сможет проникнуть по другую его сторону. Именно в этом смысле и употребляется термин потенциальный барьер.

Если же $E > U_0$, то барьер перестает выполнять свою функцию. Всюду импульс $p(x) > 0$, и частица движется беспрепятственно в одном направлении.

Взаимодействие квантовой частицы с потенциальным барьером кардинальным образом отличается от рассмотренного выше классического взаимодействия.

Простейший барьер описывается функцией

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

изображенной на рисунке.

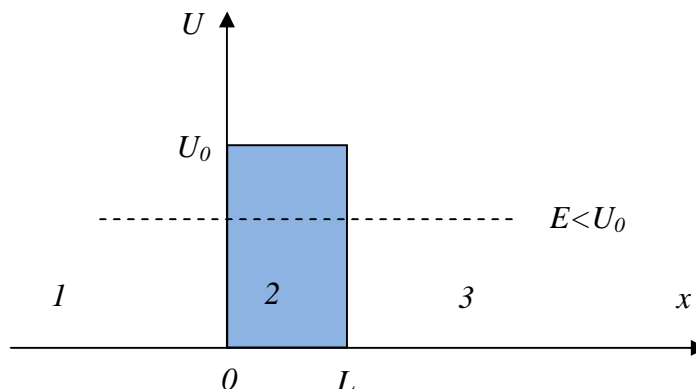


Рисунок 6

Такой потенциальный барьер, являясь идеализацией, позволяет построить аналитическое решение, отражающее основные закономерности взаимодействия квантовой частицы и барьера.

Запишем уравнение Шредингера стационарных состояний для каждой из трех областей, на которые разбивается пространство

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \psi_1}{\partial x^2} + k^2 \psi_1 &= 0, & k^2 &= \frac{2m}{\hbar^2} E, \\ \frac{\partial^2 \psi_2}{\partial x^2} + q^2 \psi_2 &= 0, & q^2 &= \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0) \\ \frac{\partial^2 \psi_3}{\partial x^2} + k^2 \psi_3 &= 0, & k^2 &= \frac{2m}{\hbar^2} E. \end{aligned}$$

Решение для каждой из трех областей можно записать в следующем виде

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}, \\ \psi_2(x) &= A_2 e^{iqx} + B_2 e^{-iqx}, \\ \psi_3(x) &= A_3 e^{ikx} + B_3 e^{-ikx}, \end{aligned}$$

коэффициенты A_i, B_i - неизвестные постоянные.

Волновые функции $\psi_i(x)$ в соответствующих областях пространства удовлетворяют уравнению Шредингера. Для областей 1 и 2 это волновые функции свободной частицы. Соответственно, e^{ikx} - частица движется вдоль оси x в положительном направлении, e^{-ikx} - в противоположном направлении.

Однако, записанные волновые функции $\psi_i(x)$ не являются решением поставленной задачи. Необходимо построить единую функцию, которая будет непрерывна так же как и ее производная во всем пространстве. Поэтому из всего множества волновых

функций необходимо выбрать лишь те, которые удовлетворяют граничным условиям на левой и правой границе барьера. Запишем сформулированные граничные условия

$$\begin{aligned}\psi_1(0) &= \psi_2(0), & \psi_1'(0) &= \psi_2'(0), \\ \psi_2(L) &= \psi_3(L), & \psi_2'(L) &= \psi_3'(L).\end{aligned}$$

Остановимся на случае, когда микрочастица движется в сторону барьера слева, а ее энергия $E < U_0$. Тогда можно положить, что коэффициент $B_3 = 0$. В задаче по определению нет частиц, движущихся из $+\infty$.

В рамках поставленной задачи можно считать коэффициент A_1 известным, он определяет плотность падающего на барьер пучка частиц. Подстановка волновых функций в граничные условия сведет их к четырем линейным алгебраическим уравнениям относительно коэффициентов B_1, A_2, B_2, A_3 , решив которые полностью, определим волновую функцию задачи.

В области 2 показатель степени экспонент чисто мнимый, поскольку

$$q = \frac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar} = i\beta, \quad \text{где } \beta = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}.$$

Тогда, подставляя волновые функции в граничные условия на левой границе барьера, получаем

$$\begin{aligned}A_1 + B_1 &= A_2 + B_2, \\ ikA_1 - ikB_1 &= -\beta A_2 + \beta B_2.\end{aligned}$$

Решая совместно, имеем

$$2ikA_1 = (ik - \beta)A_2 + (ik + \beta)B_2.$$

Граничные условия на правой границе барьера

$$\begin{aligned}A_2 e^{-\beta L} + B_2 e^{\beta L} &= A_3 e^{ikL}, \\ -\beta A_2 e^{-\beta L} + \beta B_2 e^{\beta L} &= ikA_3 e^{ikL}.\end{aligned}$$

Решая эту систему, получаем, что

$$2\beta A_2 = A_3 (\beta - ik) e^{ikL} e^{\beta L}, \quad 2\beta B_2 = A_3 (\beta + ik) e^{ikL} e^{-\beta L}.$$

Решение можно упростить, если считать барьер широким и высоким, что соответствует условию $\beta L \gg 1$. Поскольку $e^{-\beta L} \ll 1$, то $B_2 \approx 0$. Тогда, подставляя коэффициенты A_2 и B_2 в A_1 , получаем

$$4i\beta k A_1 \approx -A_3 (\beta - ik)^2 e^{ikL + \beta L}.$$

Построенная волновая функция схематично приведена на рисунке.

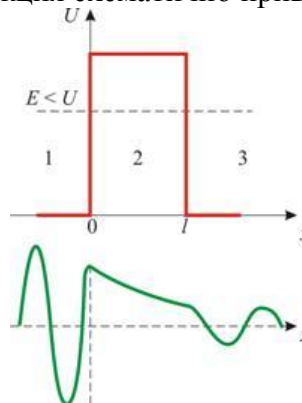


Рисунок 7

В области 1 имеем падающие на барьер и отраженные от него волны де Бройля (частицы). У частиц имеется отличная от нуля вероятность проникнуть внутрь барьера в область 2. По мере удаления от левой границы вероятность обнаружения частицы экспоненциально уменьшается. Отлична от нуля и вероятность обнаружить частицу за барьером в области 3. Являясь свободными, они движутся от барьера вправо. Этим частицам соответствуют волны де Бройля с той же частотой и энергией, которой обладают падающие на барьер частицы.

Определим коэффициент прозрачности потенциального барьера как отношение плотности потока частиц, прошедших через барьер, к плотности потока частиц, падающих на барьер. В принятых обозначениях коэффициент прозрачности равен

$$D = |A_3|^2 / |A_1|^2.$$

Тогда, для рассмотренной задачи, коэффициент прозрачности равен

$$D \approx D_0 \exp(-2\beta L) = D_0 \exp\left(-\frac{2L}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}\right),$$

где коэффициент $D_0 = \left(\frac{4\beta k}{\beta^2 + k^2}\right)^2 = 16\left(\frac{E}{U_0}\right)^2 \left(\frac{U_0}{E} - 1\right).$

Квантовые частицы проходят через барьер. Это явление получило название – туннельный эффект. Эффект заметен лишь в мире микрочастиц, тогда, когда выполняется условие $L^2 m(U_0 - E) \sim \hbar^2$. Увеличение массы частицы, ширины и высоты барьера приводят к тому, что коэффициент прозрачности становится пренебрежимо мал, и квантовая механика, согласно принципу соответствия, переходит в классическую.

Отражение и туннелирование электронного пучка, направленного на потенциальный барьер, показано на рисунке.

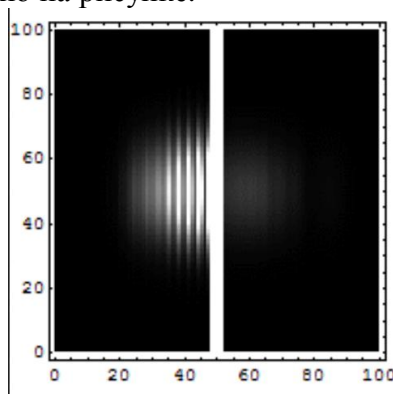


Рисунок 8

Слабое пятно справа от барьера — электроны, прошедшие сквозь барьер. Обратите внимание на интерференцию между падающими и отражающимися волнами. По [ссылке](#) доступна анимированная версия взаимодействия пучка и барьера.

Если для энергии справедливо неравенство $E > U_0$, то квантовая частица, в отличие от классической, испытает частичное отражение, пролетая и над таким потенциальным барьером. Коэффициент пропускания в этом случае $D < 1$.

Полученные результаты можно обобщить для барьера более сложной формы. Такой барьер можно приближенно заменить чередой элементарных прямоугольных барьеров различной высоты. Коэффициент прозрачности такого барьера равен произведению коэффициентов прозрачности элементарных барьеров.

С позиций классической физики туннелирование является парадоксальным явлением. Кинетическая энергия классической частицы в запрещенной для нее области барьера становится отрицательной, а импульс - мнимым. Соотношение

неопределенностей Гейзенберга позволяет снять парадоксальность с этого явления. Локализуя микрочастицу в области барьера, получаем неопределенность в отношении импульса частицы. Связанная с этим вариация значений кинетической энергии частицы может оказаться достаточной для преодоления потенциального барьера.

Туннелированием частиц сквозь потенциальный барьер объясняются многие явления атомной и ядерной физики, физики твердого тела. Так, стабильность атомных ядер обусловлена тем, что нуклоны ядра находятся в потенциальной яме. Потенциальная яма обязана взаимному действию кулоновских сил отталкивания и ядерных сил притяжения. Вместе с тем многие радиоактивные элементы, распадаясь, испускают α – частицы. Долгое время механизм такого распада оставался непонятным. Энергии α – частицы недостаточно для преодоления потенциального барьера. Квантовый подход позволил объяснить α – распад туннелированием частиц сквозь потенциальный барьер и получить количественные соотношения, наблюдаемые в эксперименте.