Министерство образования Республики Беларусь
УО «Витебский государственный технологический университет»

Тема3. «Основные положения квантовой механики»

Кафедра теоретической и прикладной математики.

разработана доц. Е.Б.Дуниной

3.1 Статистическая интерпретация волн де Бройля.

Физический смысл волн связанных по идеи де Бройля с движением частиц был раскрыт не сразу.

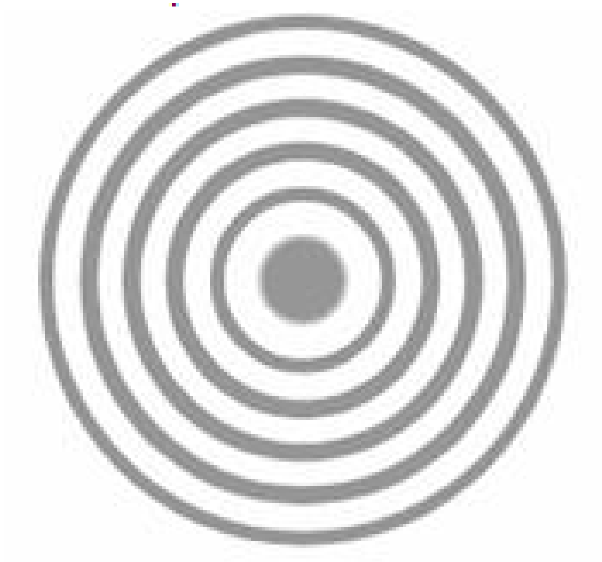
1. Вначале были попытки рассматривать частицы как образования из волн, распределенные в некоторой области пространства (волновой пакет).

Главный аргумент против этой гипотезы заключался в том, что частица является стабильным образованием. В процессе своего движения частица не изменяется.

Волновой же пакет с течением времени будет расплываться из-за дисперсии фазовых скоростей составляющих его волн, вследствие чего быстрые волны уходят вперед, а более медленные отстают.

2. Вторая точка зрения-волны возникают в среде образованной частицами, подобно звуку распространяющемуся в воздухе.

Опыт показывает, что дифракционная картина не зависит от интенсивности падающего пучка частиц, а следовательно от плотности частиц в единице объема. Чтобы получить одну и ту же дифракционную картину в опытах Томсона и Тартаковского, можно уменьшить интенсивность, но увеличить экспозицию: важно лишь общее число частиц.



$$N = 100000$$

$$1 случай \quad t = 1 сек$$

$$2 случай \quad t = 10 сек$$

$$3 случай \quad t = 100 сек$$

Плотность электронов будет разная, а дифракционная картина одинаковая.

Правильное толкование волн де-Бройля было найдено Борном.

Пусть через фольгу пропущено небольшое число электронов. Пройдя через фольгу электрон обнаружится в каком-нибудь месте фотопластинки. Мы получим картину, похожую на мишень. Только при большом числе прошедших электронов появляется система дифракционных колец.

Статистическое толкование волн де Бройля:

интенсивность волн де Бройля в каком либо месте пространства пропорциональна вероятности обнаружить частицу в этом месте.

3.2 Вероятностная интерпретация волновой функции. Принцип суперпозиции.

Пусть *x,y,z* –координаты частицы. **Только в специальных случаях состояние частицы будет описываться простыми плоскими волнами.**

В общем случае она будет представлять собой весьма сложную функцию координат *x,y,z* и времени *t*

$$\boxed{\psi(x, y, z, t).}$$

Итак, вероятность обнаружить частицу определяется интенсивностью волн, т.е. квадратом амплитуды ψ.

ψ **может быть комплексной величиной, а вероятность должна быть всегда действительной и положительной величиной.**

Поэтому за меру интенсивности берут не ψ^2,

а квадрат модуля волновой функции $|\psi|^2 = \psi^* \psi \quad (3.1)$

Рассматривая бесконечно малую область

$$x \div x + dx; \quad y \div y + dy; \quad z \div z + dz$$

мы можем считать ψ внутри этой области постоянной,

а поэтому вероятность найти частицу следует считать пропорциональной объему этой области

$$dV = dxdydz.$$

$dW(x, y, z, t)$ - вероятность, найти частицу в элементе объема *dV*, в момент времени *t*

$$dW = |\psi|^2 dV. \quad (3.2)$$

Величину $\omega(x,y,z,t)=\dfrac{dW}{dV}$ **называют плотностью вероятности**

$$\boxed{\omega(x,y,z,t)=|\psi|^2}$$

Чтобы найти частицу в момент времени *t* в объеме *V*

$$W(V,t)=\int_V dW=\int_V |\psi(x,y,z,t)|^2\,dV \quad (3.3)$$

Если проинтегрировать по всему объему, то мы получим вероятность того что частица находится где-нибудь, т.е. вероятность достоверного события

$$\int_\infty |\psi(x,y,z,t)|^2\,dV=1 \quad (3.4)$$

-условие нормировки

Принцип суперпозиции:

Пусть некоторая система находится в состоянии 1, характеризуемое волновой функцией ψ_1

и она может находится и в состоянии 2 - ψ_2,

тогда эта же система может находится и в состоянии, характеризуемом функцией ψ

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 \qquad (3.5)$$

где c_1, c_2 произвольные постоянные, в том числе и комплексные.

Если состояния входящие в суперпозицию, отличаются бесконечно мало, то вместо суммы надо брать интеграл.

3.3 Понятия об операторах физических величин.

В классической механике местоположение частицы в каждый момент времени описывается тремя числами – координатами частицы.

В квантовой механике можно говорить только о вероятности нахождения частицы в той или иной области пространства.

Эта вероятность вычисляется с помощью волновой функции.

Волновая функция не позволяет представить координаты частицы как функции времени.

Квантовая механика позволяет лишь вычислить вероятность той или иной координаты и ее среднее значение.

В связи с этим в квантовой механике физическая величина характеризуется не ее численным значением, а оператором, которая эта величина представляется.

Оператором называется правило с помощью которого каждой функции из некоторого множества сопоставляется новая функция из того же или из другого множества.

Операторы обозначаются буквами со значком сверху $\hat{A},\ \hat{B}\ldots\ldots$

Если оператор $\hat{A}$ выражает правило, согласно которому функции *u* сопоставляется функция υ

$$\boxed{\upsilon = \hat{A}u}$$

Для того чтобы удовлетворять принципу суперпозиции, используются лишь линейные операторы.

Основные положения:

1. Оператор $\hat{A}$ называется линейным, если для любых функций u_1, u_2 и для любых постоянных чисел a_1, a_2 выполняется равенство

$$\hat{A}(a_1 u_1 + a_2 u_2) = a_1 \hat{A} u_1 + a_2 \hat{A} u_2.$$

2. Если для любой функции *u*,

$$\hat{D}u = \hat{A}u + \hat{B}u, \quad \hat{D}_1 u = \hat{A}_1 u - \hat{B}_1 u, \quad \hat{D}_2 u = \hat{A}_2(\hat{B}_2 u),$$

то $\hat{D}, \hat{D}_1, \hat{D}_2$ **называются соответственно**

суммой операторов $\hat{A}, \hat{B};$

разностью операторов $\hat{A}_1, \hat{B}_1;$

и произведением операторов $\hat{A}_2, \hat{B}_2$

$$\hat{D} = \hat{A} + \hat{B}; \quad \hat{D}_1 = \hat{A}_1 - \hat{B}_1; \quad \hat{D}_2 = \hat{A}_2 \hat{B}_2.$$

3. Произведение операторов зависит от порядка сомножителей :

$$\boxed{\overset{\frown}{A}\overset{\frown}{B} \neq \overset{\frown}{B}\overset{\frown}{A},}$$

т.е. произведение операторов некоммутативно.

Например: $\hat{A} = x, \quad \hat{B} = \dfrac{d}{dx},$ **то**

$$\hat{A}\hat{B}u = x\left(\frac{d}{dx}u\right) \qquad \hat{A}\hat{B} = x\frac{d}{dx},$$

$$\hat{B}\hat{A}u = \frac{d}{dx}(xu) = u + x\frac{du}{dx} = \left(1 + x\frac{d}{dx}\right)u \qquad \hat{B}\hat{A} = 1 + x\frac{d}{dx}.$$

Получили $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}.$

Операторы $\hat{A}, \hat{B}$ **называются коммутирующими, если**

$$\boxed{\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}.}$$

Если выполняется условие $\boxed{\hat{A}\hat{B} = -\hat{B}\hat{A},}$

то операторы называются антикоммутирующими.

Оператор $\boxed{\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}}$ **называется коммутатором**

и обозначается $\boxed{\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}.}$

Антикоммутатором называется оператор

$$\boxed{\left[\hat{A}, \hat{B}\right]_{+} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}.}$$

4. Если в результате действия оператора на функцию, получается та же функция умноженная на некоторое число λ

$$\boxed{\hat{A}u = \lambda u,}$$

то λ называют собственным значением оператора, а u-собственной функцией оператора.

Совокупность собственных значений оператора называется его спектром.

5. В квантовой механике применяют только эрмитовы или самосопряженные операторы.

Оператор называется самосопряженным если

$$\boxed{\int \upsilon^* \hat{A} u dV = \int \left(\hat{A}\upsilon\right)^* u dV}$$ **или** $$\boxed{\int \upsilon^* \hat{A} u dV = \int u \hat{A}^* \upsilon^* dV}$$

Собственные значения самосопряженных операторов являются действительными числами.

6. **Собственные функции** линейного самосопряженного оператора, принадлежащие **различным собственным значениям,** ортогональны друг другу, т.е.

$$\boxed{\int u_n^* u_m dV = 0 \quad (m \neq n).}$$

Доказательство

Собственные функции удовлетворяют уравнениям

$$\hat{A}u_n = \lambda_n u_n \qquad \hat{A}u_m = \lambda_m u_m \qquad \textbf{(3.6)}$$

Из условия самосапряженности

$$\int u_n^{\,*} \hat{A} u_m dV = \int \left(\hat{A} u_n \right)^* u_m dV$$

С учетом (3.6)

$$\int u_n^{\,*} \lambda_m u_m dV = \int \left(\lambda_n u_n \right)^* u_m dV$$

$$\lambda_m \int u_n^{\,*} u_m dV = \lambda_n \int u_n^{\,*} u_m dV$$

$$\lambda_m \int u_n^{\,*} u_m dV - \lambda_n \int u_n^{\,*} u_m dV = 0$$

$$\left(\lambda_m - \lambda_n \right) \int u_n^{\,*} u_m dV = 0$$

Т.к. $\lambda_m \neq \lambda_n,$ то

$$\boxed{\int u_n^{\,*} u_m dV = 0}$$

7. В квантовой механике среднее значение любой функции $F(x, y, z)$ **можно найти по формуле**

$$\boxed{\overline{F} = \langle F \rangle = \iiint \psi^* \hat{F}(x, y, z)\psi dxdydz \quad (3.7)}$$

оператор координаты:

в качестве оператора координаты берут оператор умножения на эту координату, т.е.

$$\hat{x} f(x) = x f(x) \qquad \boxed{\hat{x} = x.}$$

оператор импульса.

Согласно гипотезы де Бройля свободная частица имеющая импульс p_x **представляется плоской волной**

с волновым числом $k_x = \dfrac{p_x}{\hbar}$ **и частотой** $\omega = \dfrac{E}{\hbar}.$

Поэтому уравнение на собственные значения для импульса

$$\hat{P}_x \psi = p_x \psi \quad (3.8)$$

должно иметь решение в виде плоских волн

$$\psi = A e^{-i\frac{(Et - p_x x)}{\hbar}} \quad (3.9)$$

Сравнивая (3.8) и (3.9) видим, что

$$\boxed{p_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}.}$$

Аналогично для других составляющих

$$\boxed{p_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y},} \quad \boxed{p_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}.}$$

$$\boxed{\hat{\vec{P}} = -i\hbar\left(\vec{i}\,\frac{\partial}{\partial x} + \vec{j}\,\frac{\partial}{\partial y} + \vec{k}\,\frac{\partial}{\partial z}\right) = -i\hbar\vec{\nabla}. \quad (3.10)}$$

Гамильтониан.

В классической физике функцией Гамильтона называется полная энергия, выраженная через импульс и координаты частиц.

Для одной частицы полная энергия сводится к сумме кинетической и потенциальной энергий

$$H(\vec{r},\vec{p}) = \frac{p^2}{2m} + U(\vec{r}).$$

В квантовой механике функции Гамильтона должен соответствовать оператор

$$\boxed{\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\vec{r}). \quad (3.11)}$$

Оператор полной энергии.

Оператор полной энергии $\hat{E}$ следует выбирать так, чтобы его собственные значения были равны энергии *E* частицы.

Его вид можно найти на примере свободной частицы.

Потребуем чтобы уравнение

$$\hat{E}\psi = E\psi \quad (3.12)$$

имело решение в виде плоской волны, описывающей свободную частицу с энергией E

$$\psi = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{-i\frac{Et-\vec{P}\vec{r}}{\hbar}}.$$

Легко заметить, что

$$\boxed{\hat{E} = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t} \quad (3.13)}$$

Вид оператора полной энергии обобщается на произвольный случай.

Момент импульса частицы.

В классической механике момент импульса определяется как

$$\vec{L} = \left[\vec{r}, \vec{P}\right] = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{vmatrix} =$$

$$= \vec{i} \begin{vmatrix} y & z \\ p_y & p_z \end{vmatrix} - \vec{j} \begin{vmatrix} x & z \\ p_x & p_z \end{vmatrix} + \vec{k} \begin{vmatrix} x & y \\ p_x & p_y \end{vmatrix}$$

Или в координатной форме

$$L_x = yp_z - zp_y, \qquad L_y = zp_x - xp_z, \qquad L_z = xp_y - yp_x.$$

В квантовой физике получим соответствующие операторы

$$\hat{L}_x = y\hat{p}_z - z\hat{p}_y = \frac{\hbar}{i}\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y} \right),$$

$$\hat{L}_y = zp_x - xp_z = \frac{\hbar}{i}\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z} \right),$$

$$\hat{L}_z = xp_y - yp_x = \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x} \right).$$

3.4 Стационарное и нестационарное уравнения Шредингера.

Основная задача квантовой механики состоит в нахождении волновой функции. Для ее решения служит волновое уравнение, найденное Шредингером в 1926г.

$$\hat{H}\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} \qquad (3.14)$$

Рассмотрим требования к волновой функции.

Волновая функция является решением дифференциального уравнения, а

$|\psi(x,y,z)|^2$ **- плотностью вероятности нахождения частицы в точке *(x,y,z)*, поэтому**

1. **Функция должна быть непрерывной, однозначной и конечной во всех точках.**

2. **В тех точках, где потенциальная энергия претерпевает разрыв конечной величины, там функция и ее первая производная должна быть непрерывна.**

3. **В области где потенциальная энергия обращается в бесконечность, волновая функция должна быть равна нулю.**

4. **Непрерывность требует, чтобы на границе этой области функция обращалась в нуль.**

Стационарное состояние это состояние которое не изменяется во времени и осуществляется при постоянной энергии.

Энергия будет сохранятся, если $\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0.$

Для свободно движущейся частицы

$$\psi = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{-i\frac{Et - \vec{P}\vec{r}}{\hbar}}$$

Выделим временную часть

$$\psi = e^{-i\frac{Et}{\hbar}} \varphi(x, y, z).$$

Подставим полученное выражение в уравнение Шредингера (3.14)

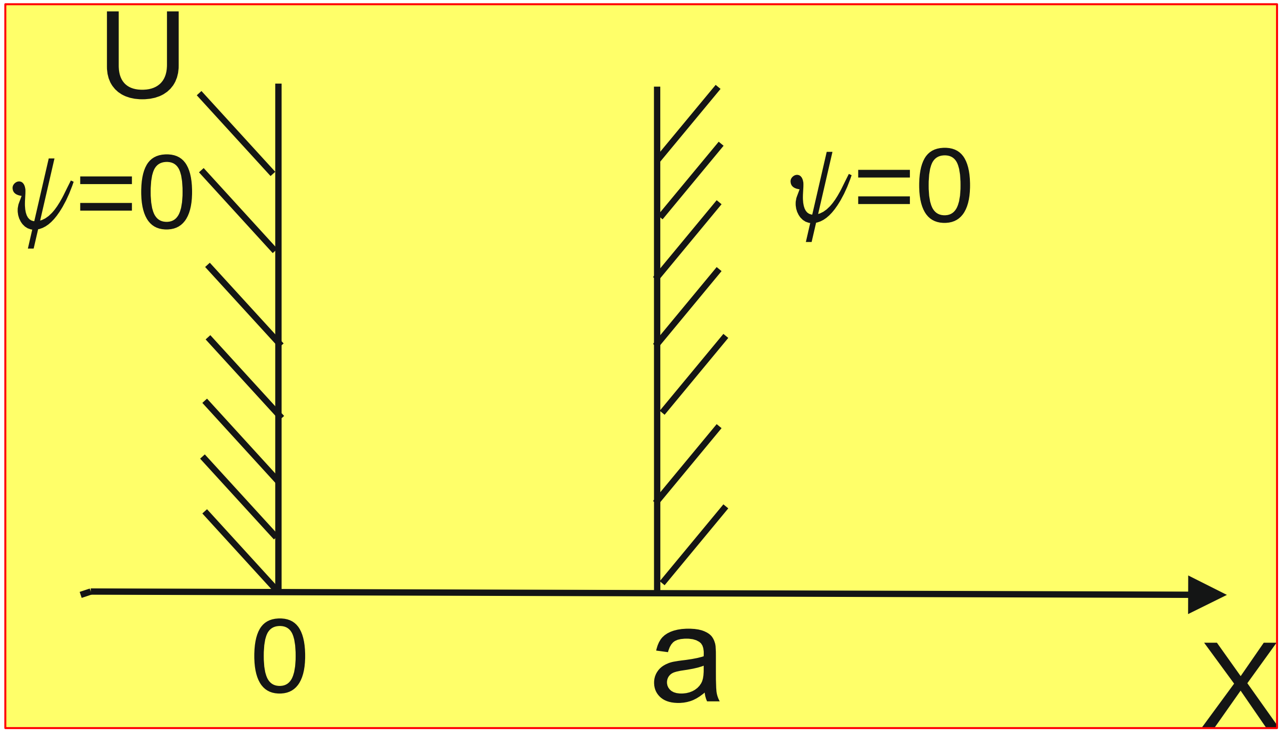
$$e^{-i\frac{Et}{\hbar}}\hat{H}\varphi(x,y,z)=i\hbar\varphi(x,y,z)\left(-\frac{iE}{\hbar}\right)e^{-i\frac{Et}{\hbar}}$$

И мы получим стационарное уравнение Шредингера

$$\boxed{\hat{H}\varphi(x,y,z)=E\varphi(x,y,z) \quad (3.15)}$$

3.5 Частица в одномерной потенциальной яме.

Потенциальная энергия частицы в зависимости от координаты имеет вид



В интервале от 0 до a **потенциальную энергию можно принять равной нулю, а вне она обращается в бесконечность.**

Вследствие этого частица не может при своем движении выйти за пределы $(0, a)$,
или говорят она находится в потенциальной яме.

Вне ямы вероятность нахождения частицы равна нулю и $\psi = 0.$

Т.к. ψ **непрерывна, то она должна быть равна нулю в точках** $x = a, x = 0.$

$$\boxed{\psi(0) = \psi(a) = 0}$$ **- граничные условия.**

Внутри ямы уравнение Шредингера можно записать

$$\hat{H}\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U$$

$$U = 0$$

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2}.$$

Гамильтониан $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ **не зависит от времени**

и поэтому можно рассматривать стационарное уравнение (3.15)

$$\hat{H}\varphi = E\varphi \qquad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2} = E\varphi, \qquad \frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\varphi = 0.$$

Составляем характеристическое уравнение

$$\lambda^2 + \frac{2mE}{\hbar^2} = 0, \qquad \lambda_{1,2} = \pm i\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}.$$

Тогда

$$\varphi = c_1 \cos\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}x + c_2 \sin\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}x.$$

Найдем произвольные постоянные

$\varphi(0)=0,$ **получим** $c_1=0.$

С учетом этого функция примет вид $\varphi = C\sin\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}x$

где $c_2 = C.$

$\varphi(a)=0,$ $0 = C\sin\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}a$ $\sin\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}a=0,$

$\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}a=\pi n$ $\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}=\frac{\pi n}{a}$ (3.16)

Возведем в квадрат $\frac{2mE}{\hbar^2}=\frac{\pi^2 n^2}{a^2}.$

Следовательно

$$\boxed{E_n = \frac{\pi^2 n^2 \hbar^2}{2ma^2} \qquad (3.17)}$$

Мы получили дискретный спектр энергий.

Волновую функцию с учетом (3.16) можно записать

$$\boxed{\varphi = C \sin \frac{\pi n}{a} x,} \qquad n = 1, 2, 3\ldots$$

Воспользуемся условием нормировки

$$\int_0^a \varphi_n^* \varphi_n dx = 1, \qquad \int_0^a C^* \sin \frac{\pi n}{a} x \cdot C \sin \frac{\pi n}{a} x dx = 1,$$

$$|C|^2 \int_0^a \sin^2 \frac{\pi n}{a} x \cdot dx = 1, \qquad |C|^2 \frac{1}{2} \int_0^a \left(1 - \cos \frac{2\pi n}{a} x\right) dx = 1,$$

$$\frac{|C|^2}{2}\left(a-\left(\sin\frac{2\pi n}{a}x\right)\cdot\frac{a}{2\pi n}\Big|_0^a\right)=1$$

Получим $$|C|^2=\frac{2}{a},$$

$$C=\sqrt{\frac{2}{a}}.$$

$$\varphi=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi n}{a}x \quad (3.18)$$

С точки зрения физики $n=0$ **надо исключить, т.к.**

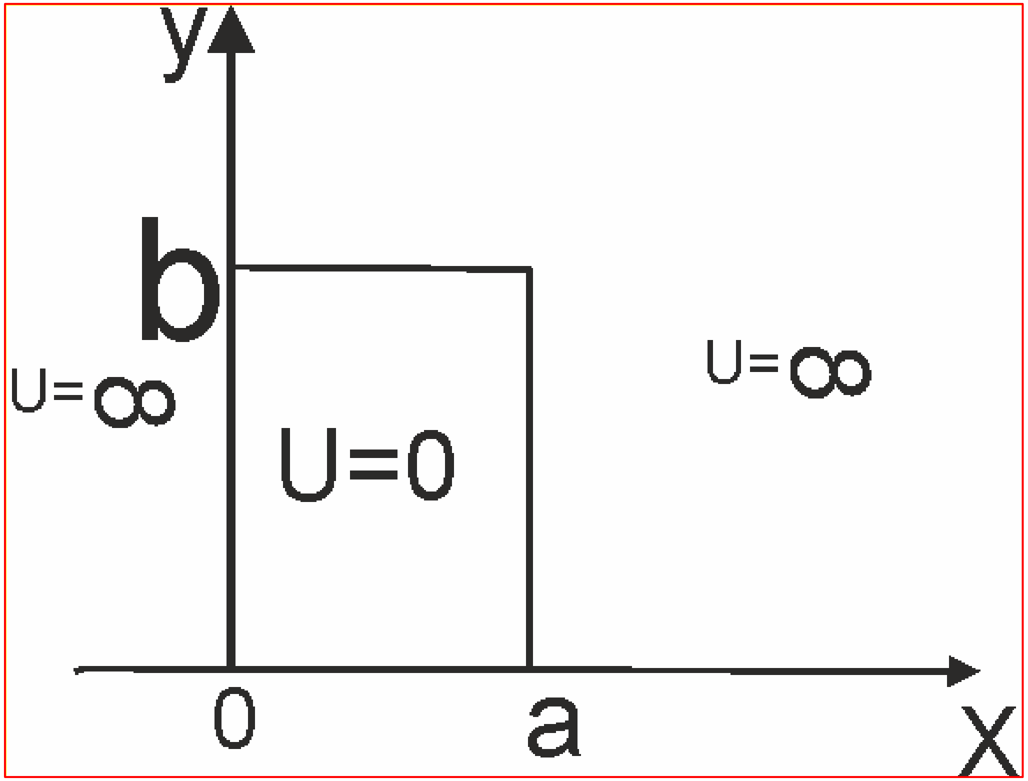
$$\varphi_0=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi 0}{a}x=0.$$

Т.е. частицы нет.

$$\varphi_1=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi}{a}x=0,\quad \varphi_2=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{2\pi}{a}x,\quad \varphi_3=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{3\pi}{a}x,$$

т.е. чем больше n, тем больше нулей.

Рассмотрим двумерную яму.



$$\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0,$$

т.е. надо решать стационарное уравнение Шредингера.

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\varphi = E\varphi,$$

$$\left(\hat{H}_x+\hat{H}_y\right)\varphi = E\varphi.$$

Мы решили для $\hat{H}_x\varphi(x) = E\varphi(x)$

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi n}{a}x.$$

Аналогично

$$\hat{H}_y\varphi(y) = E\varphi(y)$$

$$\varphi_n(y) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi n}{a}y$$

$$E_{n_x} = \frac{\pi^2 {n_x}^2\hbar^2}{2ma^2}$$

$$E_{n_y} = \frac{\pi^2 {n_y}^2\hbar^2}{2ma^2}.$$

Общее решение можно представить

$$\varphi = \varphi_{n_x}\varphi_{n_y}$$

$$E_n = E_{n_x} + E_{n_y}.$$

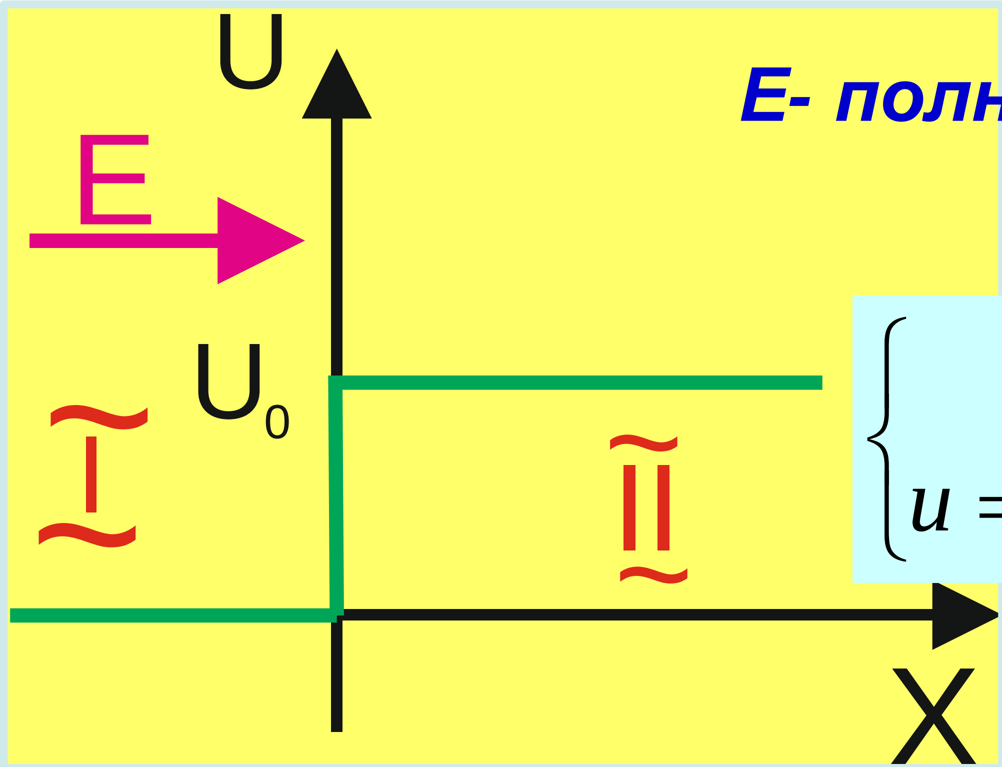
3.6 Прохождение микрочастиц через потенциальный барьер.

Потенциальным барьером называется область пространства, где потенциальная энергия больше, чем в окружающем пространстве.

Ось *ox* выберем параллельно направлению движения.

Тогда $$\Delta = \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}.$$

E- полная энергия частицы



$$\begin{cases} u = 0, \quad \text{при} \quad x \le 0 \\ u = u_0 = const, \quad \text{при} \quad x \ge 0 \end{cases}$$

Решаем уравнение Шредингера для двух областей, где *U* непрерывна.

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x).$$

Для первой области

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_1}{\partial x^2}=E\psi_1,$$

$$\frac{\partial^2\psi_1}{\partial x^2}+\frac{2mE}{\hbar^2}\psi_1=0$$

Обозначив $$\boxed{k_1^2=\frac{2mE}{\hbar^2},}$$ ***получим*** $$\frac{\partial^2\psi_1}{\partial x^2}+k_1^2\psi_1=0.$$

Для второй области

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_2}{\partial x^2}+U_0\psi_2=E\psi_2,$$

$$\frac{\partial^2\psi_2}{\partial x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-U_0)\psi_2=0$$

Обозначив $\boxed{k_2^2 = \dfrac{2m(E - U_0)}{\hbar^2},}$ получим $\dfrac{\partial^2 \psi_2}{\partial x^2} + k_2^2 \psi_2 = 0.$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial^2 \psi_1}{\partial x^2} + k_1^2 \psi_1 = 0 \qquad (I\ область) \\ \dfrac{\partial^2 \psi_2}{\partial x^2} + k_2^2 \psi_2 = 0 \qquad (II\ \ область) \end{cases}.$$

Будем учитывать, что

$$e^{ix} = \cos x + i \sin x, \qquad e^{-ix} = \cos x - i \sin x$$

Решение можно записать в виде

$$\begin{cases} \psi_1 = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x} \\ \psi_2 = A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x} \end{cases}.$$

а) *Пусть полная энергия частицы* $E > U_0.$

Согласно классической механике на границе раздела частица попадет в поле задерживающего потенциала *U*, но так как ее полная энергия $E > U_0,$

то частица преодолевает это задерживающее поле и продолжает свое движение с уменьшенной энергией

$$E - U_0.$$

С точки зрения квантовой механики движение электрона представляется плоской волной де Бройля.

На границе двух областей, волна должна вести себя так, как ведет себя световая волна на границе двух областей с различными показателями преломления, т.е. частично отражается, а частично проходит во вторую область.

Электрон имеет определенную вероятность отразится и определенную вероятность пройти во вторую область. Найдем эти вероятности.

Частное решение e^{ik_1x} и e^{ik_2x} соответствует волне, идущей в направлении положительной оси *ox*, т.е. падающей волне, а

e^{-ik_1x} и e^{-ik_2x} соответствует отраженной волне.

В первой области распространяется как падающая, так и отраженная волны.

Поэтому имеет смысл решение $\psi_1 = A_1 e^{ik_1x} + B_1 e^{-ik_1x}$

A_1^2 -интенсивность падающей волны,

B_1^2 - интенсивность отраженной волны.

Во второй области распространяется только проходящая волна, поэтому

$$B_2 = 0.$$

Решение можно записать в виде

$$\begin{cases} \psi_1 = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x} \\ \psi_2 = A_2 e^{ik_2 x} \end{cases}. \qquad (3.19)$$

Коэффициент отражения **равен отношению квадратов амплитуд отраженной и подающей волн**

$$R = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2} \qquad (3.20)$$

Коэффициент прозрачности **равен отношению проходящего потока к падающему.**

Представим цилиндр с основанием равным *1 см²* и высотой равной скорости υ.

Если плотность частиц в этом цилиндре *ρ*, то полное число частиц $\rho\upsilon$, **а следовательно коэффициент прозрачности**

$$D = \frac{\rho_2}{\rho_1}\frac{\upsilon_2}{\upsilon_1}.$$

Но плотность частиц пропорциональна квадрату амплитуды, а отношение скоростей

$$\frac{\upsilon_2}{\upsilon_1} = \frac{p_2}{p_1} = \frac{k_2}{k_1}$$

Поэтому

$$\boxed{D = \frac{|A_2|^2}{|A_1|^2}\frac{\upsilon_2}{\upsilon_1} = \frac{|A_2|^2}{|A_1|^2}\frac{k_2}{k_1}. \quad (3.21)}$$

Запишем граничные условия

$$\psi_1(0)=\psi_2(0), \quad (3.22)$$

$$\psi_1'(0)=\psi_2'(0). \quad (3.23)$$

Учитывая (3.22) и (3.19) получим

$$A_1+B_1=A_2 \quad (3.24)$$

Вычислим

$$\psi_1'=A_1 ik_1 e^{ik_1x}+B_1(-ik_1)e^{-ik_1x},$$

$$\psi_2'=A_2 ik_2 e^{ik_2x}$$

Учитывая (3.23) получим

$$A_1k_1-B_1k_1=A_2k_2 \quad (3.25)$$

Из (3.24) и (3.25) составим систему уравнений

$$\begin{cases} A_1 + B_1 = A_2 \\ A_1 k_1 - B_1 k_1 = A_2 k_2 \end{cases}$$

или

$$\begin{cases} A_1 + B_1 = A_2 \\ A_1 - B_1 = A_2 \dfrac{k_2}{k_1} \end{cases}$$

Сложим уравнения и получим

$$2A_1 = A_2\left(1 + \frac{k_2}{k_1}\right)$$

$$A_2 = \frac{2A_1 k_1}{k_1 + k_2}$$

Из (3.24)

$$B_1 = A_2 - A_1 = \frac{2A_1 k_1}{k_1 + k_2} - A_1 = A_1 \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}.$$

С учетом этого

$$R = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2} = \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2}, \qquad (3.26)$$

$$D = \frac{|A_2|^2}{|A_1|^2}\frac{k_2}{k_1} = \frac{4k_1^{\ 2}}{(k_1 + k_2)^2}\frac{k_2}{k_1} = \frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2}. \qquad (3.27)$$

С корпускулярной точки зрения R – *вероятность частицы испытать отражение на границе областей,* D *–вероятность пройти во вторую область или вероятность преодолеть потенциальный барьер.*

Проверим

$$R + D = 1.$$

$$\frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2} + \frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2} = \frac{(k_1 + k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2} = 1.$$

Если частица будет двигаться справа на лево то она тоже будет испытывать отражение, причем коэффициент отражения при движении слева на право будет равен коэффициенту отражения при движении справа на лево.

Так как $k_1^2 = \dfrac{2mE}{\hbar^2}$, $k_2^2 = \dfrac{2m(E - U_0)}{\hbar^2}$, **то**

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \qquad k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar},$$

и выражения для коэффициентов отражения и прозрачности примут вид

$$R=\frac{(k_1-k_2)^2}{(k_1+k_2)^2}=\frac{\left(\sqrt{2mE}-\sqrt{2m(E-U_0)}\right)^2}{\left(\sqrt{2mE}+\sqrt{2m(E-U_0)}\right)^2},$$

$$R=\frac{\left(\sqrt{E}-\sqrt{E-U_0}\right)^2}{\left(\sqrt{E}+\sqrt{E-U_0}\right)^2}=\left(\frac{1-\sqrt{1-\frac{U_0}{E}}}{1+\sqrt{1-\frac{U_0}{E}}}\right)^2,$$

$$D=1-R=\frac{\left(1+\sqrt{1-\frac{U_0}{E}}\right)^2-\left(1-\sqrt{1-\frac{U_0}{E}}\right)^2}{\left(1+\sqrt{1-\frac{U_0}{E}}\right)^2}=\frac{4\sqrt{1-\frac{U_0}{E}}}{\left(1+\sqrt{1-\frac{U_0}{E}}\right)^2}.$$

б) при $E < U_0,$ по классической механике переход из первой области во вторую невозможен, т.к. при этом условии потенциальная энергия больше полной.

Вычислим коэффициент отражения, пользуясь понятиями квантовой механики.

При $E < U_0$ **величина**

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

становится мнимой

$$\boxed{k_2 = i\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - E)}.}$$

Выражение

$$R = \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2}$$

заменим на

$$R = \left|\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right|^2.$$

$$R=\frac{k_1+\frac{i}{\hbar}\sqrt{2m(U_0-E)}}{k_1-\frac{i}{\hbar}\sqrt{2m(U_0-E)}}\cdot\frac{k_1-\frac{i}{\hbar}\sqrt{2m(U_0-E)}}{k_1+\frac{i}{\hbar}\sqrt{2m(U_0-E)}}=1.$$

Т.е. отражение является полным.

Неожиданным является то, что имеется определенная вероятность найти частицу во второй области.

Действительно, при $E<U_0,$

$$\psi_2=A_2e^{ik_2x}=A_2e^{i^2\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(U_0-E)}x}=A_2e^{-\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(U_0-E)}x}$$

Вероятность найти частицу

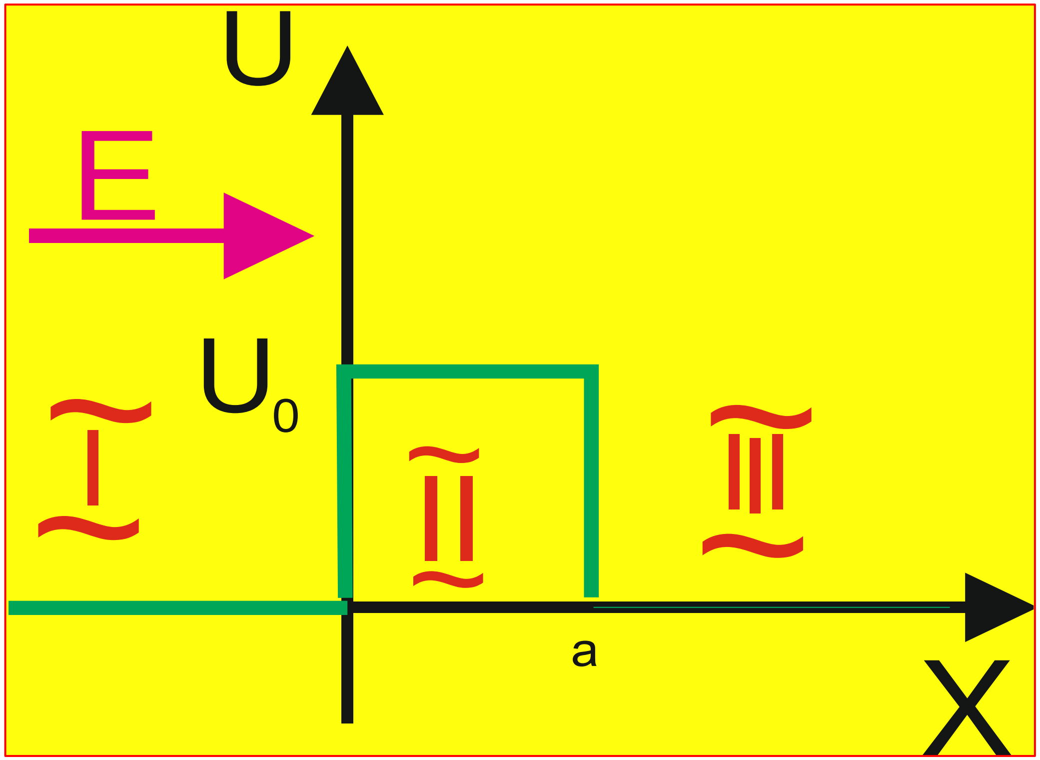
$$|\psi_2|^2 = \psi_2^* \psi_2 = A_2^2 e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - E)}x}.$$

Эта вероятность экспоненциально убывает с увеличением *x*, но она отлична от нуля: ***микроскопические частицы могут проникать в области «запрещенные» для частиц макроскопических.***

Другими словами, отражение происходит не обязательно на самой границе областей, некоторые частицы заходят во вторую область с тем, чтобы потом вернутся в первую.

3.7 Потенциальный барьер конечной ширины.

Запишем коэффициент прозрачности в данном случае.



Потенциальная энергия имеет вид

$$U = \begin{cases} 0, & x \le 0 \\ U_0, & 0 \le x \le a \\ 0, & x \ge a \end{cases}$$

Запишем уравнение Шредингера для каждой области

$$\begin{cases} \dfrac{\partial^2\psi_1}{\partial x^2} + \dfrac{2mE}{\hbar^2}\psi_1 = 0 \qquad (I\ область) \\ \dfrac{\partial^2\psi_2}{\partial x^2} + \dfrac{2m(E-U_0)}{\hbar^2}\psi_2 = 0 \qquad (II\ область) \\ \dfrac{\partial^2\psi_3}{\partial x^2} + \dfrac{2mE}{\hbar^2}\psi_3 = 0 \quad (III\ область) \end{cases}$$

Обозначим $k_1 = \dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$, $k_2 = \dfrac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar}$,

тогда решения можно записать

$$\begin{cases} \psi_1 = A_1 e^{ik_1x} + B_1 e^{-ik_1x} \\ \psi_2 = A_2 e^{ik_2x} + B_2 e^{-ik_2x}. \\ \psi_3 = A_3 e^{ik_1x} \end{cases}$$

Из граничного условия $\psi_1(0) = \psi_2(0),$ получим

$$A_1 + B_1 = A_2 + B_2. \quad (3.28)$$

Найдем первые производные

$$\psi_1' = A_1 ik_1 e^{ik_1 x} - B_1 ik_1 e^{-ik_1 x}$$

$$\psi_2' = A_2 ik_2 e^{ik_2 x} - B_2 ik_2 e^{-ik_2 x}$$

Из равенства $\psi_1'(0) = \psi_2'(0),$ получим

$$A_1 k_1 - B_1 k_1 = A_2 k_2 - B_2 k_2 \quad (3.29)$$

Запишем в виде системы

$$\begin{cases} A_1 + B_1 = A_2 + B_2 \\ A_1 - B_1 = A_2 \dfrac{k_2}{k_1} - B_2 \dfrac{k_2}{k_1} \end{cases}$$

Сложим два уравнения и получим

$$2A_1 = A_2\left(1 + \frac{k_2}{k_1}\right) + B_2\left(1 - \frac{k_2}{k_1}\right) \qquad (3.30)$$

Из граничного условия $\psi_2(a) = \psi_3(a)$, **получим**

$$A_2 e^{ik_2 a} + B_2 e^{-ik_2 a} = A_3 e^{ik_1 a} \qquad (3.31)$$

Учитывая, что $\psi_2'(a) = \psi_3'(a)$, **запишем**

$$A_2 ik_2 e^{ik_2 a} - B_2 ik_2 e^{-ik_2 a} = A_3 ik_1 e^{ik_1 a} \qquad (3.32)$$

Запишем систему

$$\begin{cases} A_2 e^{ik_2 a} + B_2 e^{-ik_2 a} = A_3 e^{ik_1 a} \\ A_2 e^{ik_2 a} - B_2 e^{-ik_2 a} = A_3 \dfrac{k_1}{k_2} e^{ik_1 a} \end{cases}$$

Сложив два уравнения системы, получим

$$A_3 e^{ik_1 a}\left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right) = 2A_2 e^{ik_2 a}.$$

Отсюда

$$A_2 = \frac{1}{2} A_3 e^{i(k_1 - k_2)a}\left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right) \quad (3.33)$$

Вычтем из первого уравнения системы второе

$$2B_2e^{-ik_2a} = A_3.e^{ik_1a}\left(1-\frac{k_1}{k_2}\right).$$

Тогда

$$B_2 = \frac{1}{2}A_3.e^{i(k_1+k_2)a}\left(1-\frac{k_1}{k_2}\right). \quad (3.34)$$

Подставим (3.33) и (3.34) в (3.30)

$$2A_1 = \frac{1}{2}A_3e^{i(k_1-k_2)a}\left(1+\frac{k_1}{k_2}\right)\left(1+\frac{k_2}{k_1}\right)+$$

$$+\frac{1}{2}A_3.e^{i(k_1+k_2)a}\left(1-\frac{k_1}{k_2}\right)\left(1-\frac{k_2}{k_1}\right) \qquad (3.35)$$

Выполним действия со скобками

$$\left(1+\frac{k_1}{k_2}\right)\left(1+\frac{k_2}{k_1}\right)=\frac{k_2+k_1}{k_2}\cdot\frac{k_1+k_2}{k_1}=\frac{(k_1+k_2)^2}{k_1k_2},$$

$$\left(1-\frac{k_1}{k_2}\right)\left(1-\frac{k_2}{k_1}\right)=\frac{k_2-k_1}{k_2}\cdot\frac{k_1-k_2}{k_1}=-\frac{(k_1-k_2)^2}{k_1k_2}$$

Выражение (3.35) примет вид

$$2A_1=\frac{1}{2}A_3e^{i(k_1-k_2)a}\frac{(k_1+k_2)^2}{k_1k_2}-\frac{1}{2}A_3.e^{i(k_1+k_2)a}\frac{(k_1-k_2)^2}{k_1k_2}$$

$$4A_1k_1k_2=$$
$$=A_3\left(e^{i(k_1-k_2)a}(k_1+k_2)^2-e^{i(k_1+k_2)a}(k_1-k_2)^2\right)$$

$$A_3 = \frac{4k_1k_2}{e^{i(k_1-k_2)a}\left(k_1+k_2\right)^2 - e^{i(k_1+k_2)a}\left(k_1-k_2\right)^2}A_1.$$

$$A_3 = \frac{4k_1k_2e^{-ik_1a}}{e^{-ik_2a}\left(k_1+k_2\right)^2 - e^{ik_2a}\left(k_1-k_2\right)^2}A_1. \quad (3.36)$$

Коэффициент прозрачности

$$D = \frac{\left|A_3\right|^2}{\left|A_1\right|^2}\frac{\upsilon_3}{\upsilon_1}$$

Так как $\dfrac{\upsilon_3}{\upsilon_1} = \dfrac{k_3}{k_1} = 1,$ **то** $D = \dfrac{\left|A_3\right|^2}{\left|A_1\right|^2}.$

Для нас представляет интерес величина D в том случае, когда $E < U_0.$

Тогда

$$k_2 = \frac{i\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar} = ik.$$

Будем искать

$$\left|A_3\right|^2 = A_3{}^* A_3$$

$$A_3 = \frac{4k_1 ike^{-ik_1 a}}{e^{ka}\left(k_1 + ik\right)^2 - e^{-ka}\left(k_1 - ik\right)^2} A_1.$$

$$A_3{}^* = \frac{-4k_1 ike^{ik_1 a}}{e^{ka}\left(k_1 - ik\right)^2 - e^{-ka}\left(k_1 + ik\right)^2} A_1^*.$$

Перемножим отдельно знаменатели

$$\left(e^{ka}\left(k_1+ik\right)^2-e^{-ka}\left(k_1-ik\right)^2\right)\cdot$$

$$\cdot\left(e^{ka}\left(k_1-ik\right)^2-e^{-ka}\left(k_1+ik\right)^2\right)=$$

$$=e^{2ka}\left(k_1^2+k^2\right)^2-\left(k_1+ik\right)^4-\left(k_1-ik\right)^4+$$

$$+e^{-2ka}\left(k_1+ik\right)^2.$$

$$\left|A_3\right|^2=\frac{16k_1^{\,2}k^2}{\left(k_1^2+k^2\right)^2\left(e^{2ka}+e^{-2ka}\right)-\left(k_1+ik\right)^4-\left(k_1-ik\right)^4}\left|A_1\right|^2.$$

Упростим знаменатель

$$\left(k_1 + ik\right)^2 = k_1^2 + 2ik_1k - k^2,$$

$$\left(k_1 + ik\right)^4 = k_1^4 - 4k_1^2k^2 +$$
$$+ k^4 + 4ik_1^3k - 2k_1^2k^2 - 4ik_1k^3 =$$
$$= k_1^4 - 6k_1^2k^2 + k^4 + 4ik_1^3k - 4ik_1k^3$$

$$\left(k_1 - ik\right)^2 = k_1^2 - 2ik_1k - k^2$$

$$\left(k_1 - ik\right)^4 = k_1^4 - 4k_1^2k^2 +$$

$$+ k^4 - 4ik_1^3ik - 2k_1^2k^2 + 4ik_1k^3 =$$

$$= k_1^4 - 6k_1^2k^2 + k^4 - 4ik_1^3ik + 4ik_1k^3$$

$$\left(k_1 + ik\right)^4 + \left(k_1 - ik\right)^4 =$$

$$= k_1^4 - 6k_1^2 k^2 + k^4 + 4ik_1^3 k - 4ik_1 k^3 +$$

$$+ k_1^4 - 6k_1^2 k^2 + k^4 - 4ik_1^3 ik + 4ik_1 k^3 =$$

$$= 2k_1^4 - 12k_1^2 k^2 + 2k^4.$$

$$\left|A_3\right|^2 = \frac{16k_1^{\,2}k^2}{\left(k_1^2+k^2\right)^2\left(e^{2ka}+e^{-2ka}\right)-2k_1^4+12k_1^2k^2-2k^4}\left|A_1\right|^2.$$

Разделим числитель и знаменатель на два

$$\left|A_3\right|^2 = \frac{8k_1^{\,2}k^2}{\left(k_1^2+k^2\right)^2\dfrac{\left(e^{2ka}+e^{-2ka}\right)}{2}-k_1^4+6k_1^2k^2-k^4}\left|A_1\right|^2.$$

Учтем, что

$$\frac{\left(e^{2ka}+e^{-2ka}\right)}{2} = ch2ka = sh^2ka + ch^2ka.$$

Так как

$$ch^2 ka - sh^2 ka = 1,$$

получим

$$\frac{\left(e^{2ka} + e^{-2ka}\right)}{2} = ch2ka =$$

$$= sh^2 ka + 1 + sh^2 ka = 1 + 2sh^2 ka.$$

$$|A_3|^2 = \frac{8k_1^{\ 2}k^2}{\left(k_1^2 + k^2\right)^2\left(1 + 2sh^2ka\right) - k_1^4 + 6k_1^2k^2 - k^4}|A_1|^2.$$

$$|A_3|^2 = \frac{8k_1^{\ 2}k^2}{\left(k_1^2 + k^2\right)^2 2sh^2ka + 8k_1^2k^2}|A_1|^2.$$

$$|A_3|^2 = \frac{4k_1^{\ 2}k^2}{\left(k_1^2 + k^2\right)^2 sh^2ka + 4k_1^2k^2}|A_1|^2.$$

$$\boxed{D = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} = \frac{4k_1^{\ 2}k^2}{\left(k_1^2 + k^2\right)^2 sh^2ka + 4k_1^2k^2}.}$$

$$sh^2 ka = \left(\frac{e^{ka} - e^{-ka}}{2} \right)^2 = \frac{1}{4}\left(e^{2ka} + e^{-2ka} - 2e^0 \right)$$

e^{-2ka} **-можно считать маленькой величиной.**

Например, для электронов

$$U - E = 150 эВ; a = 10^{-8} см; ka = 6.28$$

Поэтому $e^{2ka} = 2{,}8 \cdot 10^6; e^{-2ka} = 3{,}5 \cdot 10^{-7}$

$$D = \frac{4k_1^2 k^2}{\left(k_1^2 + k^2\right)^2 \frac{1}{4} e^{2ka} + 4k_1^2 k^2}.$$

Разделим на

$$k_1^2 k^2$$

$$D = \frac{4}{\frac{1}{4}\left(\frac{k_1}{k} + \frac{k}{k_1}\right)^2 e^{2ka} + 4}.$$

В знаменателе *4* можно отбросить по сравнению с e^{2ka}

т.к. k_1 и k одного порядка величины, то

$$D \approx const \cdot e^{-2ka} = const \cdot e^{-2\frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}a}. \quad (3.37)$$

Формула показывает, что проницаемость барьера очень сильно зависит от ширины a.

Явление проникновения частицы через потенциальный барьер называют туннельным эффектом.

3.8 Эффект Рамзауэра

При прохождении через газовую среду электроны сталкиваются с атомами газа.

В зависимости от энергии электронов различают упругие и неупругие столкновения.

Упругие столкновения не сопровождаются изменением внутренней энергии атомов газа. Доля кинетической энергии, передаваемой при упругом столкновении электроном атому или наоборот, по порядку величины равна отношению масс электрона и атома, т.е. $(m_e/m_{am}) \sim 10^{-4}$

Такое столкновение происходит практически без изменения кинетической энергии электрона, меняется лишь направление его движения. Упругие столкновения проявляются при наличии электронов с кинетической энергией до единиц эВ, такие электроны носят название **“медленных”** электронов.

Столкновения, в результате которых внутренняя энергия атома и кинетическая энергия электрона изменяются, называются неупругими.

При неупругих столкновениях первого рода электрон отдает часть своей энергии на возбуждение или ионизацию атома, при этом его кинетическая энергия уменьшается.

Неупругие столкновения первого рода имеют место, если налетающие электроны имеют достаточную для возбуждения атома кинетическую энергию (десятки или сотни эВ), в этом случае их называют **“быстрыми”** электронами.

В результате **неупругих столкновений второго рода** электрону передается часть энергии возбуждения атома или вся эта энергия, поэтому такого вида столкновения могут происходить лишь между электронами и атомами в возбужденном состоянии.

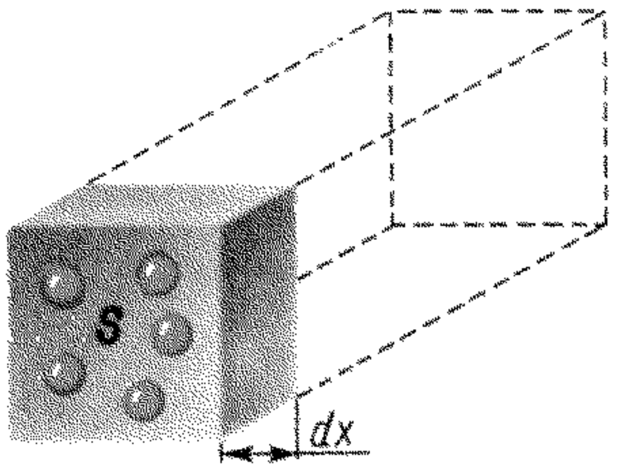
Столкновение электрона с отдельным атомом является случайным событием, имеющим определенную вероятность.

Эту вероятность столкновения можно характеризовать с помощью величины, носящей название эффективного сечения рассеяния.

При моделировании процесса рассеяния электрон считается точечной частицей, а атом газа рассматривается в виде воображаемого шара с площадью поперечного сечения σ, численно равной вероятности столкновений электрона с одним из атомов.

Значение величины σ для одного и того же атома различно для разных процессов, и для процесса упругого рассеяния она выбирается такой, что при попадании в круг площадью σ электрон отклоняется от своего первоначального направления.

Если электрон попадает на площадку S слоя толщиной dx газа с концентрацией атомов n_0, то в направлении движения электрона находится число атомов газа, равное n_0Sdx,



а сумма поперечных сечений упругих столкновений электрона с атомами газа равна $dS=\sigma n_0 Sdx$.

Тогда вероятность столкновения электрона с одним из атомов в слое dx равна

$$dP=dS/S = \sigma n_0 dx.$$

Если столкновения электрона с атомами происходят независимо друг от друга, то вероятность события растет пропорционально x.

Длина пути $<l>$, при которой эта вероятность равна единице, называется средней длиной свободного пробега.

Сечение упругого рассеяния зависит от энергии электронов *E*.

Чем больше *E*, тем больше скорость электрона и тем меньше угол, на который отклоняется электрон при взаимодействии с атомом при прочих равных условиях. Это означает, что при уменьшении энергии (скорости) электронов сечение упругого рассеяния должно увеличиваться.

В 1921 году, исследуя прохождение электронного потока очень медленных (с энергией от 0,75 до 1,1 эВ) электронов в различных газах, Рамзауэр обнаружил, что в аргоне при уменьшении энергии электронов упругое рассеяние уменьшается, в результате чего электроны проходят через газ практически беспрепятственно.

Независимо от этих наблюдений Таунсенд и Бейли исследовали упругое рассеяние электронов в газах в диапазоне энергий электронов между 0,2 и 0,8 эВ и показали, что минимум рассеяния достигается при значении энергии около 0,39 эВ.

Для энергий электронов, превышающих *16* эВ, сечение рассеяния σ возрастает с уменьшением *E* в соответствии с предсказаниями классической теории.

При энергии электронов меньше *16 эВ* сечение рассеяния убывает с уменьшением *E* и при *E ≈ 1 эВ*, σ практически обращается в нуль. При дальнейшем уменьшении энергии электронов сечение рассеяния вновь возрастает.

Явление, когда атомы инертного газа становятся как бы несуществующими для электронов, обладающих определенной энергией, и электроны пролетают сквозь них без столкновений, носит название эффекта Рамзауэра - Таунсенда.

Эффект Рамзауэра-Таунсенда необъяснним с точки зрения классической теории.

Эффект считается одним из фундаментальных экспериментальных доказательств наличия у электронов волновых свойств.

Для объяснения эффекта Рамзауэра достаточно использовать соотношение де Бройля и рассмотреть интерференцию волн де Бройля.

Движущемуся электрону соответствует волна, длина которой определяется соотношением

$$p = \hbar k = \hbar \frac{2\pi}{\lambda}, \qquad m\upsilon = \hbar \frac{2\pi}{\lambda}, \qquad \lambda = \frac{2\pi\hbar}{m\upsilon},$$

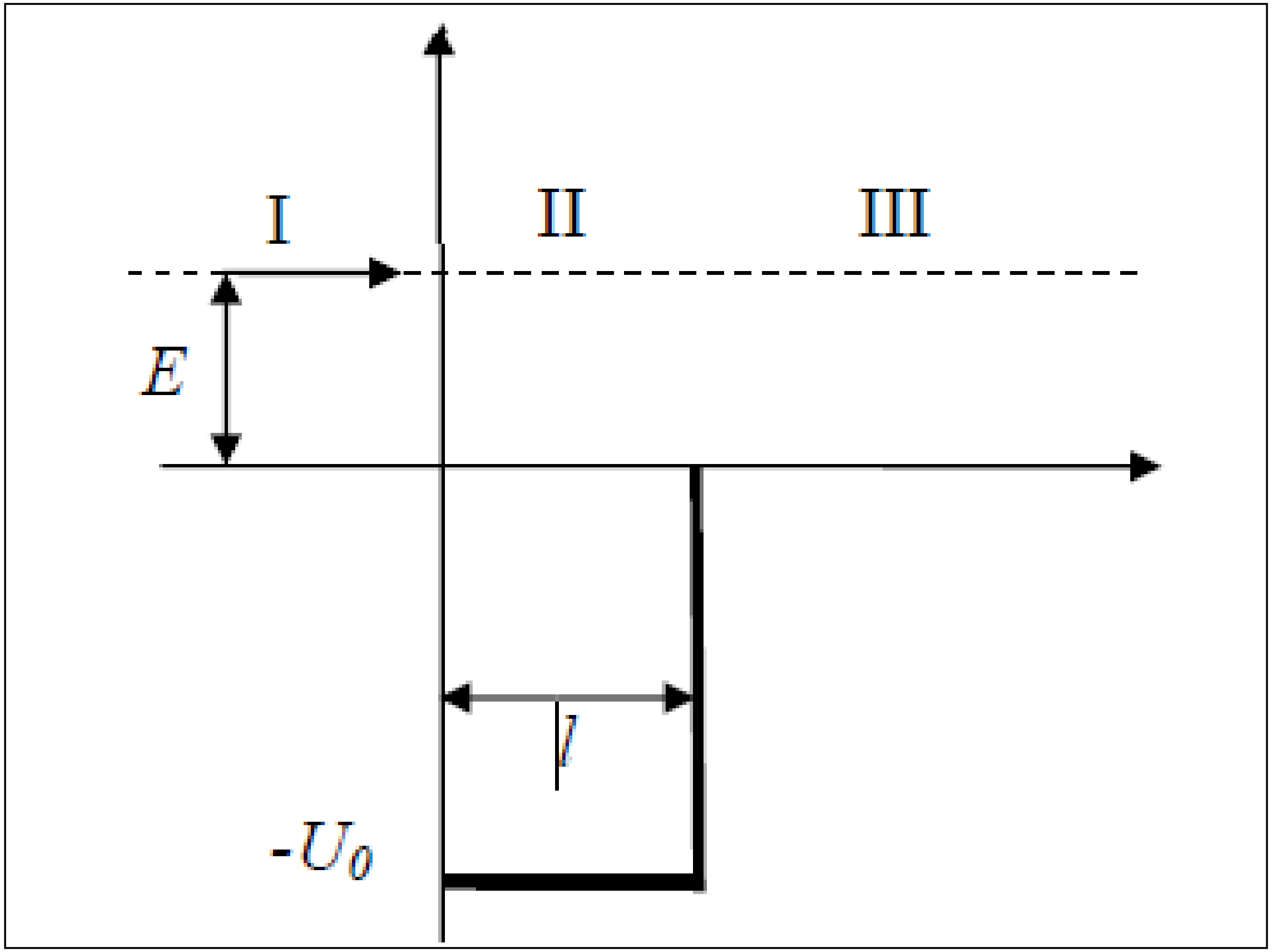
где m, υ ***-масса и скорость электрона.***

Если кинетическая энергия невелика, то $\lambda = \dfrac{2\pi\hbar}{\sqrt{2mE}}.$

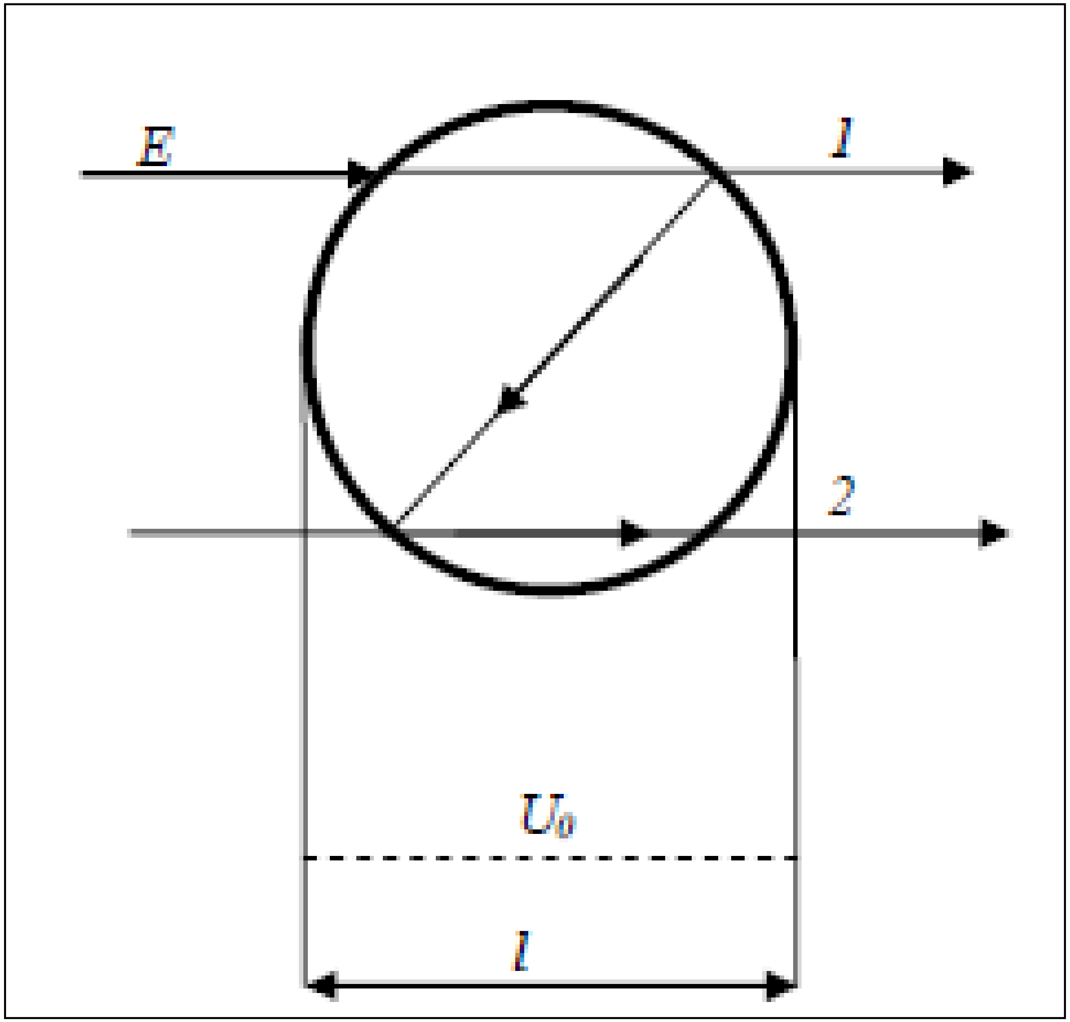
При прохождении электрона через атом длина волны де Бройля становится меньше

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m(E + U_0)}}.$$

где U_0 **- увеличение энергии за счет взаимодействия электрона с атомом.**



При этом происходит интерференция прошедших через атом волн 1 и 2, отраженных от передней и задней границ атома.



Пусть l – эффективный размер атома. Прошедшая волна 1 усилится волной 2, если разность хода между ними

$$\Delta = 2l = \lambda_1$$

– условие 1-го интерференционного максимума, т.е. при выполнении:

$$2l = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m(E_1 + U_0)}}.$$

Прошедшая волна ослабнет, если

$$\Delta = 2l = \frac{3}{2}\lambda_2$$

- условие интерференционного минимума, т. е.

$$2l = \frac{3}{2}\frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m(E_2 + U_0)}}.$$

3.9 Гармонический осциллятор.

Гармоническим осциллятором в классической физике называют частицу, на которую действует сила, пропорциональная отклонению частицы из положения равновесия и направленная к нему.

Осциллятор называется одномерным, если частица двигается только вдоль одной прямой.

$$F=-kx,\quad U=\frac{kx^2}{2},$$

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

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

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+U(x)=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{m\omega^2x^2}{2}.$$

$$\frac{\partial\hat{H}}{\partial t}=0$$

поэтому достаточно решать стационарное уравнение Шредингера

$$\hat{H}\varphi=E\varphi,$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2}+\frac{m\omega^2x^2}{2}\varphi=E\varphi.$$

Перейдем к безразмерной энергии и безразмерной координате

$$\varepsilon = \frac{E}{\hbar\omega},\ \mathrm{g} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$$

Разделим уравнение Шредингера на $\hbar\omega$

$$-\frac{\hbar}{2m\omega}\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2} + \frac{m\omega x^2}{2\hbar}\varphi = \frac{E}{\hbar\omega}\varphi.$$

Тогда

$$dg = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}dx$$

$$-\frac{\partial^2\varphi}{2\partial g^2} + \frac{g^2}{2}\varphi = \varepsilon\varphi,$$

$$\boxed{\frac{\partial^2\varphi}{\partial g^2} + \left(2\varepsilon - g^2\right)\varphi = 0.}$$

Решая уравнение получим

$$\boxed{E = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)}$$

т.е. что энергия квантована и наименьшее значение энергии

$$\boxed{E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} \neq 0}$$

Уровни энергии эквидистантны, т.е. находятся на равных расстояниях друг от друга.

$$\boxed{\varphi_n(g) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} e^{-g^2/2} H_n(g).}$$

$H_n(g)$ **-полином степени n (Полином Чебышева-Эрмитта).**

$$H_0(g) = 1, \qquad H_1(g) = 2g,$$

$$H_2(g) = 4g^2 - 2,$$

$$H_3(g) = 8g^3 - 12g,$$

$$H_4(g) = 16g^4 - 48g^2 + 12,$$

$$H_5(g) = 35g^5 - 160g^3 + 120g.$$

В общем виде их можно представить

$$H_n(g) = (-1)^n e^{g^2} \frac{d^n(e^{-g^2})}{dg^n}$$

Например при n=1

$$H_1(g) = (-1)^1 e^{g^2} \frac{d\ (e^{-g^2})}{dg} =$$

$$= -e^{g^2} e^{-g^2}(-2g) = 2g.$$

3.10 Соотношение неопределенностей.

Если коммутатор равен нулю, то одновременно величины в одном и том же состоянии могут иметь определенные значения или их можно измерить со сколь угодно большой точностью одновременно.

Если $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] \neq 0,$ **то точность измеряемых величин взаимосвязана, измеряем одну теряем точность другой.**

Вычислим коммутатор координаты *x* и импульса $\hat{P}_x$

$$\left[\hat{P}_x, \hat{x}\right] = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} x - x\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) =$$

$$= i\hbar\left(-\frac{\partial}{\partial x} x + x\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi = i\hbar\left(-\frac{\partial}{\partial x}(x\psi) + x\frac{\partial \psi}{\partial x}\right) =$$

$$= i\hbar\left(-\psi - x\frac{\partial \psi}{\partial x} + x\frac{\partial \psi}{\partial x}\right) = -i\hbar\psi = -i\hbar. \qquad (3.38)$$

Аналогично

$$\left[\hat{P}_y, \hat{y}\right] = -i\hbar,$$

$$\left[\hat{P}_z, \hat{z}\right] = -i\hbar.$$

Однако
$$\left[\hat{P}_x, \hat{y}\right] = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}y - y\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right) =$$
$$= i\hbar\left(-\frac{\partial}{\partial x}(y\psi) + y\frac{\partial\psi}{\partial x}\right) =$$
$$= i\hbar\left(-y\frac{\partial\psi}{\partial x} + y\frac{\partial\psi}{\partial x}\right) = 0. \qquad (3.39)$$

Из (3.38) следует, что координата и импульс при измерении не могут давать одновременно определенных значений. Измеряя в некотором состоянии одновременно у частицы координату и импульс, мы будем получать значения этих величин, разбросанные около некоторых средних.

Такой разброс в математике характеризуется дисперсией или средним квадратичным отклонением.

Соотношение неопределенностей, установленное Гейзенбергом, выражает связь между дисперсией координаты и импульса частицы.

Обозначим $< x >= \overline{x} \quad \text{и} \quad < p >= \overline{p}$

- средние значения координаты и импульса.

$$\Delta x = x - \overline{x}$$

$$< \Delta x >= \overline{x - \overline{x}} = \overline{x} - \overline{x} = 0.$$

Дисперсии, характеризующие разброс величины около их средних значений, вычисляются по формулам

$$< (\Delta x)^2 >= \overline{(x - \overline{x})^2} = \overline{x^2 - 2x\overline{x} + \overline{x}^2} =$$

$$= \overline{x^2} - \overline{2x\overline{x}} + \overline{\overline{x}^2} = \overline{x^2} - \overline{x}^2.$$

Аналогично $$< (\Delta p)^2 >= \overline{(p - \overline{p})^2} = \overline{p^2} - \overline{p}^2.$$

Для дальнейших расчетов удобно выбрать такую систему координат, в которой

$$\overline{x} = 0, \overline{p} = 0.$$

Пусть ψ некоторая произвольная функция системы в каком либо состоянии. Тогда

$$\overline{(\Delta x)^2} = \overline{x^2} = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) x^2 \psi(x) dx \qquad (3.40)$$

$$\overline{(\Delta p)^2} = \overline{p^2} = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \hat{p}^2 \psi(x) dx =$$

$$= -\hbar^2 \int\limits_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} dx \qquad (3.41)$$

Соотношение неопределенностей устанавливает связь между

$$\sqrt{\overline{(\Delta x)^2}} \quad \text{и} \quad \sqrt{\overline{(\Delta p)^2}}\,.$$

Для нахождения этой связи рассмотрим интеграл

$$J(\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} \left| \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} + \xi x \psi(x) \right|^2 dx =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial \psi^*(x)}{\partial x} + \xi x \psi^*(x) \right) \left(\frac{\partial \psi(x)}{\partial x} + \xi x \psi(x) \right) dx;$$

$$J(\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial x} dx +$$

$$+ \xi^2 \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* x^2 \psi dx + \xi \int_{-\infty}^{\infty} x \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right) dx;$$

$$J(\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial x} dx +$$

$$+ \xi^2 \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* x^2 \psi dx + \xi \int_{-\infty}^{\infty} x \left(\frac{\partial}{\partial x} \left(\psi^* \psi \right) \right) dx; \qquad (3.42)$$

Введем обозначения

$$A = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* x^2 \psi dx = \overline{x^2} = \overline{\left(\Delta x\right)^2};$$

$$B = -\int_{-\infty}^{\infty} x\left(\frac{\partial}{\partial x}\left(\psi^{*}\psi\right)\right)dx = -\int_{-\infty}^{\infty} xd\left(\psi^{*}\psi\right) =$$

$$= \begin{bmatrix} x = u; \quad dx = du \\ d\upsilon = d\left(\psi^{*}\psi\right); \quad \upsilon = \psi^{*}\psi \end{bmatrix} =$$

$$= -\left(x\psi^{*}\psi \Big|_{=\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \psi^{*}\psi dx \right) = -\left(0 - 1\right) = 1$$

$$C=\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\frac{\partial\psi}{\partial x}dx=\begin{bmatrix} u=\dfrac{\partial\psi}{\partial x} \\ d\upsilon=d\psi^* \end{bmatrix}=$$

$$=\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}\Bigg|_{-\infty}^{\infty}-\int\limits_{-\infty}^{\infty}\psi^*\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}dx=-\int\limits_{-\infty}^{\infty}\psi^*\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}dx;$$

Учитывая, что $\hat{P}_x^2=-\hbar^2\dfrac{\partial^2}{\partial x^2},$ **запишем**

$$C=\frac{1}{\hbar^2}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\psi^*\hat{P}_x^2\psi dx=\frac{1}{\hbar^2}\overline{P_x^2}=\frac{1}{\hbar^2}\overline{\left(\Delta P_x\right)^2}.$$

Формула (3.42) примет вид

$$J(\xi) = A\xi^2 - B\xi + C \geq 0. \qquad (3.43)$$

Неравенство выполняется для любых ξ

если нет корней.

По определению в нашем случае *A>0 (ветви параболы направлены вверх).* Корней не будет если *D<0*.

$$B^2 - 4AC \leq 0,$$

$$B^2 \leq 4AC,$$

$$1 \leq 4AC,$$

$$4\overline{(\Delta x)^2}\frac{1}{\hbar^2}\overline{(\Delta P_x)^2} \geq 1,$$

$$\overline{(\Delta x)^2}\,\overline{(\Delta P_x)^2} \geq \frac{\hbar^2}{4},$$

$$\sqrt{\overline{(\Delta x)^2}}\sqrt{\overline{(\Delta P_x)^2}} \geq \frac{\hbar}{2}.$$

-Соотношение неопределенностей.

Соотношение показывает, что импульс и координата частицы не могут одновременно иметь определенные значения и минимально возможное произведение ограничивается постоянной Планка.

Величины $\sqrt{\overline{(\Delta x)^2}}$ и $\sqrt{\overline{(\Delta P_x)^2}}$ **не могут быть одновременно равными нулю.**

Соотношение неопределенностей может быть обобщено на произвольные физические величины *L* и *M*, операторы которых $\hat{L}, \hat{M}$.

Если известен коммутатор этих операторов

$$\left[\hat{L}, \hat{M}\right] = i\hat{K}, \qquad \hat{K} - \textit{эрмитов оператор},$$

то

$$\sqrt{\overline{(\Delta L)^2}}\sqrt{\overline{(\Delta M)^2}} \geq \frac{\left|\overline{K}\right|}{2}, \qquad (3.44)$$

где

$$\overline{(\Delta L)^2} = \overline{(L - \overline{L})^2}, \qquad \overline{(\Delta M)^2} = \overline{(M - \overline{M})^2}.$$

Чаще (3.44) записывают в виде $\boxed{\Delta L \Delta M \geq \frac{\left|\overline{K}\right|}{2},}$

при этом надо учитывать, что $\Delta L, \Delta M$

корни квадратные из дисперсий.

Получим соотношение неопределенностей для энергии.

Оператор энергии для частицы $\hat{E} = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$

$$\left[\hat{E}, t\right] = \left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t}, t\right] = \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}t - ti\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)\psi =$$

$$= i\hbar \frac{\partial}{\partial t}(t\psi) - ti\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi =$$

$$= i\hbar\psi + ti\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi - ti\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi = i\hbar\psi = i\hbar.$$

$$\left[\hat{E}, t\right] = i\hbar.$$

$$\boxed{\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (3.45)}$$

Давая физическую интерпретацию (3.45) надо помнить:

***1.** величиной, которая измеряется на эксперименте, является не полная энергия какого-то состояния, а разность энергий при переходе из одного состояния в другое.*

При переходе от разброса энергий ΔE

к разбросу разности энергий двух состояний

$$\Delta(E-E')$$

надо удвоить правую часть неравенства (3.45)

$$(\Delta E \to |\Delta E| + |\Delta E'|).$$

$$\boxed{\Delta(E-E')\Delta t \geq \hbar. \quad (3.46)}$$

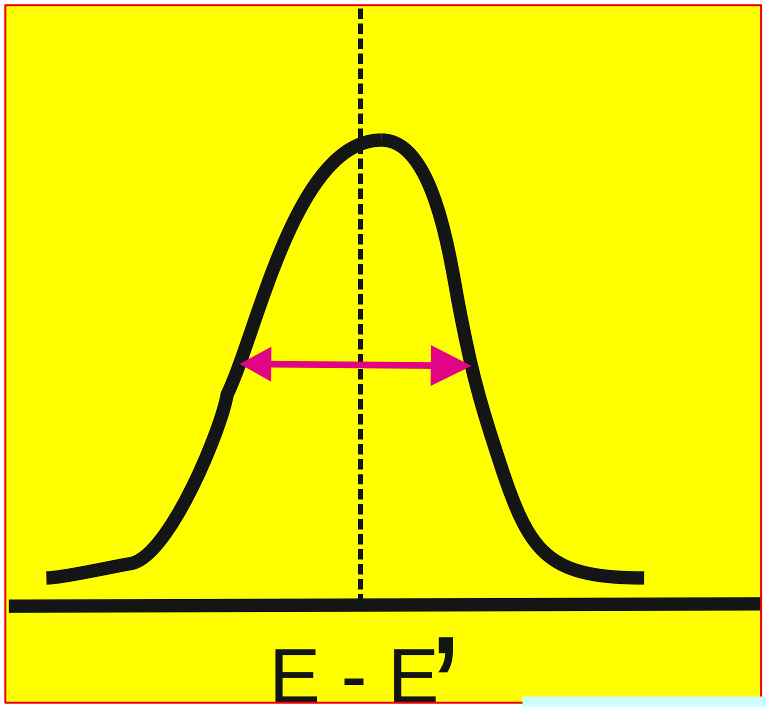
2.время течет непрерывно, поэтому нет той «средней точки», относительно которой можно было бы рассматривать Δt как разброс каких-то моментов.

Под Δt **следует понимать отрезок времени, в течение которого реализуется переход системы из состояния с энергией *E* в состояние с энергией *E'*.**

Рассмотрим излучение атомов.

При переходе электрона в атоме из одного состояние в другое излучается квант света. Известно, что спектральные линии излучения имеют определенную ширину.

Т.е. переход между уровнями характеризуется не строго определенной энергией *E- E'*, а спектром энергий или как говорят шириной спектральной линии (ширина измеряется на половине ее высоты).



Т.е. по естественной ширине линии излучения можно определить

$$\Delta(E - E'),$$

и из (3.46) вычислить время жизни атома в возбужденном состоянии

$$\Delta t = \tau = \frac{\hbar}{\Delta(E - E')}.$$

Далее можно найти вероятность того, что система в единицу времени перейдет из одного состояния в другое. Эта вероятность равна обратному значению времени жизни системы относительно рассматриваемого перехода.

$$W = \frac{1}{\tau} = \frac{\Delta(E - E')}{\hbar}.$$