**РЕФЕРАТ**

**на тему:”Найпростіші задачі квантової механіки”**

**План**

1. Рух вільної частинки

2. Частинка в одновимірному потенціальному ящику

3. Гармонічний квантовий осцилятор

4. Проходження частинки крізь потенціальний бар’єр. Тунельний ефект

**1**. **Рух вільної частинки**

Найпростішим рухом квантової частинки є вільний рух. Прикладом такого руху є рух електронів в металах і напівпровідниках. В цьому випадку потенціальна енергія частинок дорівнює нулю. При вільному русі повна енергія частинки збігається з кінетичною, а її швидкість є сталою величиною. Такому рухові в класичній механіці відповідає рівномірний і прямолінійний рух.

Нехай рівномірний рух квантової частинки відбувається в напрямі осі *х*, яка збігається з напрямком вектора швидкості. Стаціонарне рівняння Шредінгера для вільної частинки запишеться:

 (1.3.15)

де *m* ― маса частинки; *Е* ― повна енергія частинки.

Рівняння (1.3.15) є диференціальним рівнянням другого порядку зі сталими коефіцієнтами, розв’язком якого може бути функція

 (1.3.16)

де *А* і *к* ― сталі величини; *і* ― уявна одиниця.

Підстановка (1.3.16) в (1.3.15) дасть тотожність



звідки

 (1.3.17)

У співвідношенні (1.3.17) *к* - хвильове число хвиль де Бройля; *Е* ― повна енергія частинки; *m* ― маса частинки.

Енергія вільної частинки з рівності (1.3.17) дорівнює

 (1.3.18)

Хвильове число *к* може набувати довільних значень, тому що вільні частинки в системі можуть мати практично будь-які постійні швидкості. Це говорить про те, що енергетичний спектр вільних частинок є суцільним.

Густина імовірності перебування вільної частинки в довільних точках осі *х* дорівнює



де - комплексно спряжена хвильова функція. Звідки



Густина імовірності вільної частинки в будь-якій точці осі *х* є сталою величиною. Невизначеності вільної частинки в координаті в такому випадку дорівнюють безмежності. Цей висновок є добрим підтвердженням співвідношення невизначеностей Гейзенберга.

**2.** **Частинка в одновимірному потенціальному ящику**

Розглянемо приклад просторово-обмеженого одновимірного руху квантової частинки в глибокому потенціальному ящику з вертикальними стінками, шириною *l*. Потенціальна енергія електрона зовні і всередині такого ящика має наступні значення:

*U(x)=0* при *0<x<l*, (1.3.19)

*U(x)=* при *x0* й *x l*.

Графік залежності потенціальної енергії частинки *U(x)* від *х* показаний на рис 1.5.

Частинка в такому ящику може вільно рухатись на ділянці 0х*l*. На кінцях цього інтервалу вона стикається з абсолютно твердими стінками. Непрозорість цих стінок визначається необмеженим ростом потенціальної енергії *U(x)* в точках *х=0* і *х*=*l*.



Рис. 1.5

Прикладом руху електрона в потенціальному ящику може бути рух колективізованих електронів усередині металу. Як відомо, у класичній електронній теорії вважали, що поза металом потенціальна енергія електрона дорівнює нулю, а всередині металу ― вона від’ємна і чисельно дорівнює роботі виходу електрона з металу. Інакше кажучи, вважали, що рух електронів обмежений потенціальним бар’єром прямокутної форми з плоским дном. У нашому випадку потенціальний ящик значно простішої форми ніж реальний випадок електрона в металі.

Оскільки частинка не виходить за межі ділянки *0  х  l*, то імовірність знайти її за межами цієї ділянки дорівнює нулю. Це означає, що рівняння Шредінгера для стаціонарних станів можна доповнити граничними умовами і 

Запишемо рівняння Шредінгера для частинки в потенціальному ящику

 (1.3.20)

де *m* ― маса частинки;  ― стала Дірака; *Е* ― повна енергія частинки; *(х)* ― хвильова функція.

Введемо позначення

 (1.3.21)

де *к* ― хвильове число хвиль де Бройля для електрона, який перебуває всередині потенціального ящика.

Рівняння (1.3.20) набуде вигляду

. (1.3.22)

Знайдемо розв’язок рівняння (1.3.22), подібно до аналогічних диференціальних рівнянь гармонічних коливань, у тригонометричній формі

 (1.3.23)

де *А, В* і *С* ─ сталі величини.

З граничних умов одержуємо:

а) *(0)=0*; *0=АcosB.0+CsinB.0,*

звідки *А=0*; *В0* і *С0*.

б) *(l)=0*; *0=CsinB.l,*

звідки при *С0, Вl=n*, або  де *n = 1,2,3,*...

Хвильова функція з урахуванням граничних умов набуде вигляду:

 (1.3.24)

Константу *С* у формулі (1.3.24) знайдемо з умови нормування

, (1.3.25)

або

. (1.3.26)

Другий інтеграл у виразі (1.3.26) для будь-яких значень *n* дорівнює нулю, тому

, звідки 

Хвильова функція, яка описує квантовий рух частинки в потенціальному ящику, має вигляд:

 (1.3.27)

При підстановці (1.3.27) у (1.3.22) одержуємо тотожність

,

звідки

 (1.3.28)

Енергія Е електрона в потенціальному ящику не може бути довільною. Вона набуває лише дискретних власних значень *Е(n)*. Імовірність виявити в межах потенціального ящика електрон з іншою енергією, ніж (1.3.28) дорівнює нулю.

Що ми одержали в результаті розв’язування рівняння Шредінгера? *По-перше,* *набір псі-функцій*, які залежать від квантового числа *n*. *По-друге, значення енергії Е*, при яких розв’язок рівняння Шредінгера має фізичний зміст. *По-третє, розподіл імовірності* виявлення частинки в різних точках осі *x* усередині ящика. Подібні ж результати виходять при розв’язуванні рівняння Шредінгера й в інших випадках, наприклад, для атома водню.

Енергетичний спектр і густина імовірності частинки в потенціальному ящику показана на рис. 1.6.

ω

*x*

*l*

n=4

n=3

n=2

n=1

Рис. 1.6

Число n у формулі (1.3.28) визначає вид хвильової функції й енергію частинки в стані з цією хвильовою функцією і називається *квантовим числом*. Покажемо, що для частинки в потенціальному ящику можливі лише такі енергетичні рівні, на яких на ширині ящика вкладається лише ціле число півхвиль де Бройля. При аналізі граничних умов було показано, що *kl=n*, де  ― хвильове число хвиль де Бройля. З урахуванням останнього маємо:

 (1.3.29)

Співвідношення (1.3.29) показує, що в потенціальному ящику можливі лише такі стани частинки, при яких на ширині потенціального ящика *l* вкладається ціле число півхвиль де Бройля (рис. 1.7).

*x*

*l*

n=4

n=3

n=1

n=2

ω

#### Рис. 1.7

#### Незбуреному стану частинки (n=1) відповідає енергія

 (1.3.30)

Значення цієї енергії *Еl0* свідчить про те, що частинка в потенціальному ящику ніколи не зупиняється і що невизначеність *Рх* імпульсу частинки не може бути меншою за величину

 (1.3.31)

В потенціальному ящику шириною *l* положення частинки визнача-ється похибкою, яка сумірна з його шириною х*l,* тому що перебуває у повній відповідності із співвідношенням невизначеностей імпульс - координата.

Покажемо, як залежить ширина енергетичного інтервалу *Е* від розмірів потенціального ящика. У потенціальному ящику з розмірами *l=10-9 м* власні значення енергії електрона утворюють послідовність енергетичних рівнів, енергетична відстань між якими дорівнює

*E=En+1-En,*

або

 Дж.

В електрон-вольтах ця енергія буде дорівнювати



Цей розрахунок показує, що коли ширина потенціального ящика сумірна з розмірами атома (10-10м), енергетичний інтервал між сусідніми енергетичними рівнями досить значний, а спектр є дискретним.

У випадку, коли потенціальний ящик має макроскопічні розміри *l10-2 м*, енергетичний інтервал між сусідніми рівнями буде дорівнювати

Дж=0,34.10-14(2n+1) eB.

Для такого потенціального ящика квантуванням енергії можна знехтувати. Вона нічим не відрізняються від значень енергії, одержаних класичними методами.

Аналогічні результати можна одержати для великих квантових чисел *n*. У цьому випадку проявляється принцип відносності, встановлений Бором у 1923 р.

При великих квантових числах висновки й результати квантової механіки збігаються з відповідними класичними результатами.

**3. Гармонічний квантовий осцилятор**

Просторово-обмеженим є також рух квантового осцилятора. З класичної точки зору осцилятором може бути будь-яка матеріальна точка, яка здійснює гармонічні коливання під дією квазіпружної сили

*F=-kx*, де *k=m*. (1.3.33)

# Потенціальна енергія класичного осцилятора знаходиться за формулою

 (1.3.34)

де *m* ― маса частинки;  ― циклічна частота осцилятора.

Графічна залежність потенціальної енергії класичного осцилятора показана на рис. 1.8.



Рис. 1.8

З рисунка видно, що осцилятор може мати практично довільну енергію, навіть рівну нулю. В точках *-а* і *+а* кінетична енергія осцилятора дорівнює нулю, а потенціальна енергія досягає свого максимуму. За межі області *(-а, +а)* класичний осцилятор вийти не може.

Квантовим осцилятором може бути лише елементарна частинка, яка поряд із корпускулярними властивостями проявляє і хвильові властивості. Прикладом квантового осцилятора може бути коливний рух атомів і молекул у вузлах кристалічної гратки. Потенціальна енергія квантового осцилятора має ту ж математичну залежність, що і класичний осцилятор (1.3.34).

Стаціонарне рівняння Шредінгера для лінійного гармонічного осцилятора має вигляд:

 (1.3.35)

де *m ―* маса квантової частинки;  ― власна циклічна частота; *Е* ― повна енергія частинки.

Знаходження хвильових функцій квантового осцилятора є досить складною математичною задачею. Тому, опускаючи такі розв’язки, наводимо енергетичний спектр квантового осцилятора. Він має вигляд

 (1.3.36)

де *n= 0,1,2,3,*... ― будь-яке ціле число, починаючи з нуля;  ― власна циклічна частота осцилятора;  ― стала Дірака.

Аналіз рівняння (1.3.36) показує, що енергетичний спектр квантового осцилятора є дискретним і що власні значення енергії дорівнюють:

, , 

В енергетичному спектрі (1.3.36) проміжки між енергетичними рівнями не залежать від квантового числа *n*, а є однаковими

 (1.3.37)

Як показано на рис. 1.9, де енергетичний спектр квантового осцилятора суміщається з аналогічним спектром класичного осцилятора, квантовий осцилятор не має значень енергії рівних нулю.



Рис.1.9

Найменше значення енергії квантового осцилятора дорівнює

. (1.3.38)

Меншої енергії квантовий осцилятор не може мати навіть при абсолютному нулі температур.

Покажемо наближеним способом, що енергія квантового осцилятора квантується. З рис 1.10 видно, що на відрізку *l=2х0* вкладається ціле число півхвиль де Бройля, тобто

 (1.3.39)

де  ― середнє значення довжини хвилі де Бройля.

Звідки

 (1.3.40)



Рис. 1.10

Середнє значення імпульсу кванта хвилі де Бройля

 (1.3.41)

Середня кінетична енергія такого осцилятора

 (1.3.42)

Відомо, що повна енергія *Е* перевищує середнє значення кінетичної енергії у два рази, тобто

 (1.3.43)

З іншої точки зору повна енергія квантового осцилятора дорівнюватиме максимальній потенціальній енергії

 (1.3.44)

Перемножимо рівності (1.3.43) і (1.3.44), одержимо

 (1.3.45)

або

 (1.3.46)

В межах точності наших міркувань 1, тому

 (1.3.47)

де *n =1,2,3*,... ― цілі числа.

Наближений розрахунок показує, що енергія квантового осцилятора набуває ряду дискретних значень, тобто квантується.

Точне значення енергії для не збудженого квантового осцилятора нульового рівня можна одержати з рівняння Шредінгера (1.3.35), якщо згідно з рис. 1.10 скористатись функцією Гаусса, яка дорівнює

 (1.3.48)

де *а* ― стала величина, яку слід визначити.

Другу похідну від (1.3.48) підставимо в (1.3.35)



звідки

. (1.3.49)

Тотожність (1.3.49) має місце у випадку рівності коефіцієнтів при *х2* і вільних членів, тобто

  (1.3.50)

Система рівнянь (1.3.50) дає можливість одержати значення енергії *Е* і сталої величини *а*

 . (1.3.51)

Таким чином функція Гаусса є розв’язком рівняння Шредінгера (1.3.35) лише за умови коли .

В цьому випадку

. (1.3.52)

Слід відмітити, що оскільки відстань між суміжними рівнями енергії квантового осцилятора дорівнює  то з урахуванням  одержуємо енергетичний спектр квантового осцилятора у вигляді

 (1.3.53)

де *n = 0,1,2,3,*...

**4. Проходження частинки крізь потенціальний бар’єр. Тунельний ефект**

Класична частинка не може перебувати в тих місцях, де її потенціальна енергія *U(x)* перевищувала б повну енергію частинки *E*. Щодо квантової частинки, то вона має таку властивість через те, що існує відмінна від нуля імовірність проникнення її крізь потенціальний бар’єр, тобто в область, де *U(x)  E.*

Проведемо оцінку цієї імовірності шляхом розв’язування такої задачі. Нехай квантова частинка з масою *m*, рухаючись в напрямі осі *х*, вдаряється в потенціальний бар’єр кінцевої висоти *U0*, тобто



причому енергія частинки *Е* менша висоти бар’єра *U0*, (рис. 1.11).



Рис. 1.11

В області потенціального бар’єра рівняння Шредінгера для стаціонарних станів набуде вигляду

 (1.3.54)

Якщо позначити вираз  через , то рівняння (1.3.54) перепишеться

. (1.3.55)

#### Розв’язком рівняння (1.3.55) може бути функція

, (1.3.56)

де *А* і *В ─* деякі константи.

Експонента з додатним знаком фізичного змісту не має й може бути відкинута, тому що не повинно бути зростання імовірності в області потенціального бар’єра. Тому в області потенціального бар’єра (*х*), хвильова функція частинки *x* визначається рівністю

*x = Аe-**x.* (1.3.57)

Коефіцієнт *А* у виразі (1.3.57) пов’язаний з інтенсивністю променя частинок, які рухаються у напрямі бар’єра, а тому задається довільно. Як правило для *х* координати частинок розподіляються з густиною імовірності

, (1.3.58)

де *0* дорівнює значенню *x*2 при *х=0.*

Рівняння (1.3.58) показує, що із збільшенням глибини проникнення в область потенціального бар’єра, густина імовірності *х* зменшується експоненційно. Це зменшення буде тим швидше, чим більша різниця енергій *U0 - E.*

Знайдемо глибину проникнення елементарної частинки в область потенціального бар’єра при умові, що *m*= *9,1 10-31 кг* (електрон), *U0 - E =* *10-4 eB*, а густина імовірності *(х* на цій відстані зменшується в *е* разів

.

Ця відстань перевищує на два порядки діаметр атома водню. Глибина проникнення зменшується на порядок, якщо різниця енергій *U0 - E* зросте до *10-2* *еВ*.

Здатність квантових частинок проникати в область потенціального бар’єра приводить до *тунельного ефекту.*Його суть полягає в проникненні частинки з однієї області в іншу область, які поділені потенціальним бар’єром навіть в тих випадках, коли енергія частинки *Е* менша висоти потенціального бар’єра *U0*.

Таке проходження частинки виявляється можливим дякуючи існуванню під бар’єром хвильової функції, яка «прокладає» шлях частинці на будь-яку відстань. Тунельний ефект є головною причиною -розпаду радіоактивних ядер.