ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Двойственная природа света

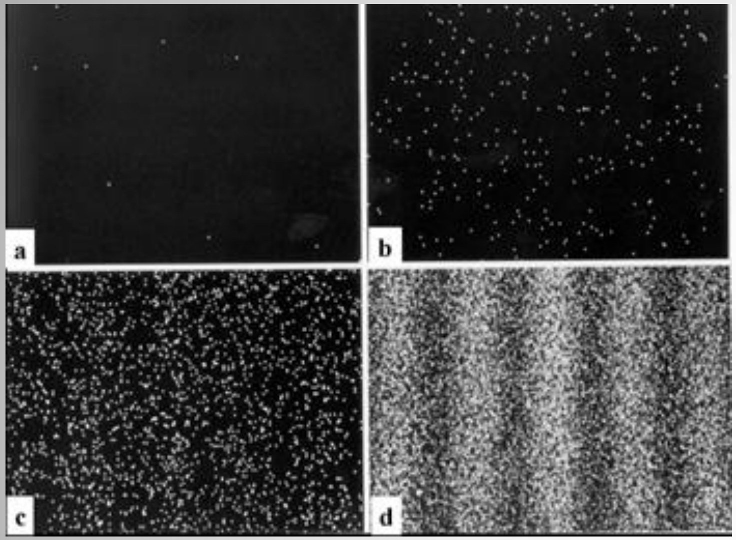
1. Закон излучения М. Планка $E = h\nu$, кванты (1900).
2. Теория фотоэффекта А. Эйнштейна (1907)
3. Дуализм света. Эффект Комптона (1922)
4. Всеобщность дуализма. Л. де Бройль (1924)
5. Дифракция электронов. К.Дэвиссон, Л.Джермер

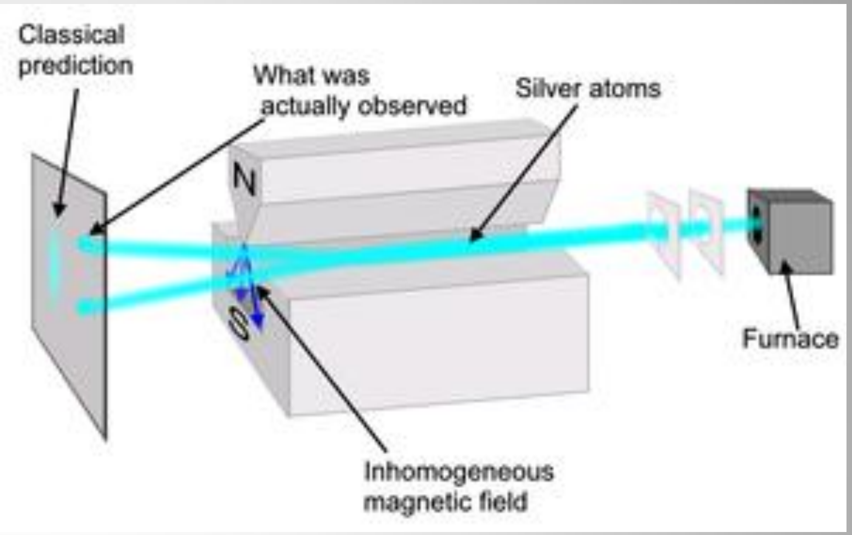
Невозможность объяснить существование устойчивых атомов и их оптические спектры на основе классических представлений

1. Теория Н.Бора (1913)
2. Опыты Франка и Герца (1913-1914)

Уравнение Шредингера (1926)

ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ





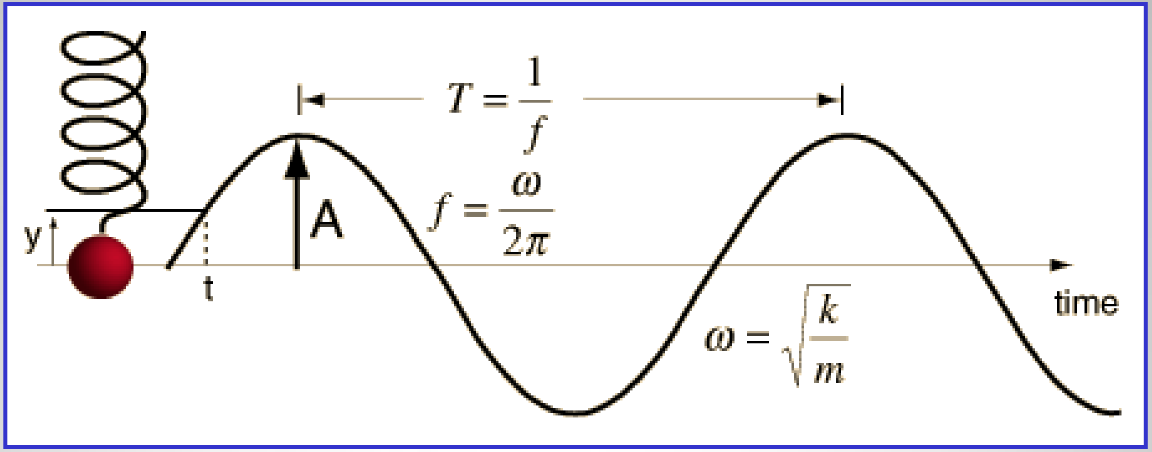
Дэвиссон и Джермер:

дифракция и интерференция электронов

Штерн и Герлах:

квантование магнитного момента

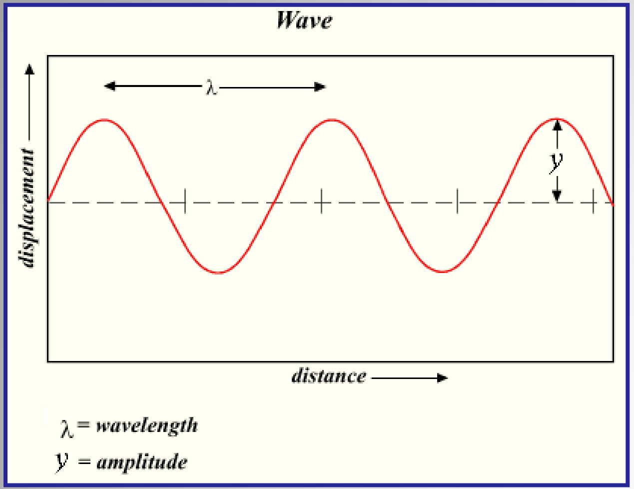
Гармонические колебания



$$\begin{cases} F = m\dfrac{d^2y}{dt^2} \\ F = -Ky \end{cases} \Rightarrow \quad \frac{d^2y}{dt^2} + \frac{K}{m}y = 0$$

$$y(t) = A\exp\{i(\omega t - \varphi)\}$$

Аналогия с плоской гармонической волной



$$\Phi(x,t) = A\exp\{i(kx-\omega t)\}$$

$$k = \frac{\omega}{v} = \frac{2\pi}{\lambda}, \quad p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k$$

$$E = \hbar\omega$$

Волна де Бройля:

$$\Phi(x,t) = A\exp\left\{\frac{i}{\hbar}(px - E\,t)\right\}$$

$$\Phi(\mathbf{r},t) = A\exp\left\{\frac{i}{\hbar}(\langle \mathrm{p}|\mathrm{r}\rangle - E\,t)\right\}, \quad \langle \mathrm{p}|\mathrm{r}\rangle = p_x x + p_y y + p_z z$$

Стационарное уравнение Шредингера

Движение свободной частицы

$$\frac{\partial^2\Phi}{\partial x^2} = -\frac{1}{\hbar^2}\mathrm{p}_x^2\Phi \quad \rightarrow \quad \mathrm{p}_x\Phi = -i\hbar\frac{\partial\Phi}{\partial x}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Phi = E\Phi,\ \ \Delta\Phi = \frac{\partial^2\Phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Phi}{\partial z^2}$$

$$\Phi(\mathrm{r},t) = \Psi(\mathrm{r})\,\Omega(t) \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi = E\Psi$$

Движение частицы в потециальном поле U(r)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi = [E - U(\mathrm{r})]\Psi \quad \rightarrow \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + U(\mathrm{r})\Psi = E\Psi,\ \left(\mathrm{H}\Psi = E\Psi\right)$$

Нестационарное уравнение Шредингера

Движение свободной частицы

$$\frac{\partial\Phi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}E\Phi, \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Phi = E\Phi \;\rightarrow\; i\hbar\frac{\partial\Phi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Phi$$

Основное уравнение квантовой механики
(Нестационарное уравнение Шредингера)

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + U(\mathrm{r})\Psi, \quad \left(i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \mathrm{H}\Psi\right)$$

Аналогия с классической механикой

$$\boldsymbol{E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad \vec{\mathbf{p}} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}}$$

Классическая энергия атома He

$$E = T + U = \frac{P_{He}^2}{2M_{He}} + \frac{p_{e(1)}^2 + p_{e(2)}^2}{2m_e} + \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} - \sum_{i=1}^{2} \frac{2e^2}{|\mathrm{R} - \mathbf{r}_i|}$$

Гамильтониан атома He

$$\mathbf{H}_{He} = -\frac{\hbar^2}{2M_{He}} \Delta_{He} - \frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_{i=1}^{N} \Delta_{e(i)} + \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} - \sum_{i=1}^{2} \frac{2e^2}{|\mathrm{R} - \mathbf{r}_i|}$$

Основные постулаты квантовой механики

1. Любое состояние физической системы полностью описывается некоторой функцией Ψ координат системы и времени, называемой функцией состояния или волновой функцией системы.

2. Каждой физической величине в квантовой механике отвечает определенный оператор.

3. В результате измерений физической величины в любой квантовой системе могут быть получены только такие значения, которые являются собственными значениями соответствующего оператора

4. Волновая функция должна удовлетворять уравнению Шредингера

Вероятностная трактовка волновой функции

М. Борн: Величина $|\Psi|^2\, d\tau$ определяет вероятность нахождения системы в элементе объема $d\tau$

Условия регулярности волновой функции:

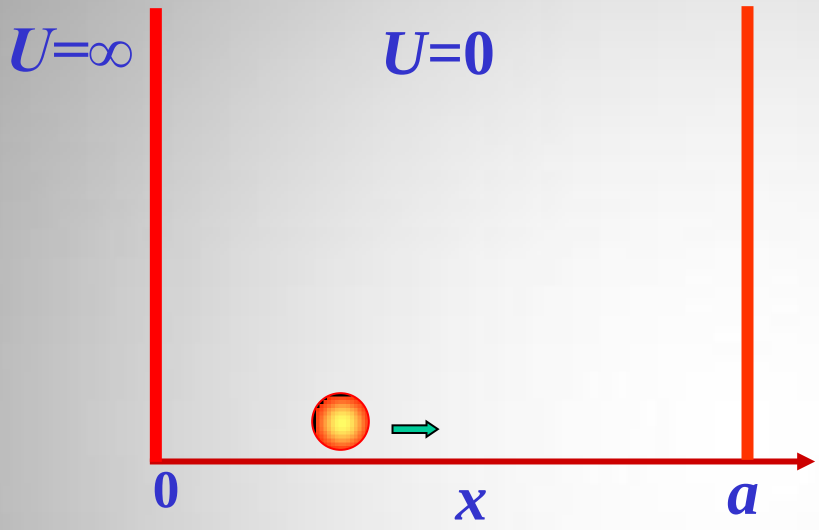
I. Функция Ψ должна быть однозначной, конечной и непрерывной во всем пространстве переменных

II. Функция Ψ должна подчиняться условию нормировки

$$\int |\Psi|^2\, d\tau = 1$$

Квантовое описание менее подробное, чем классическое. Задача квантовой механики - определение вероятности того или иного результата при измерении заданной физической характеристики системы.

Частица в одномерной потенциальной яме



$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi}{dx^2}+U(x)\Psi=E\Psi$$

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

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}E\Psi=0,\quad \Psi(0)=\Psi(a)=0$$

$$\Psi(x)=A\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right),\ n=1,2,3\ldots \qquad E_n=\frac{1}{2m}\left(\frac{\pi\hbar}{a}n\right)^2$$

Общие свойства волновой функции частицы в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками

$$\int_0^a \Psi(x)\Psi^*(x)dx = 1 \rightarrow AA^*\int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx = 1$$

$$A = \exp(i\varphi)\sqrt{\frac{2}{a}}, \qquad \Psi(x) = \exp(i\varphi)\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

Нормированная волновая функция определена лишь с точностью до постоянного фазового множителя

$$\int_0^a \Psi_n(x)\Psi_m(x)dx = \delta_{m,n}$$

Ортогональность волновых функций, отвечающих разным значениям энергии

Квантование энергии

Решение уравнения Шредингера само по себе к квантованию энергии не приводит. Квантование возникает из-за граничных условий, наложенных на волновую функцию.

$$E_n = \frac{1}{2m}\left(\frac{\pi\hbar}{a}n\right)^2, \quad n = 1, 2, 3\ldots$$

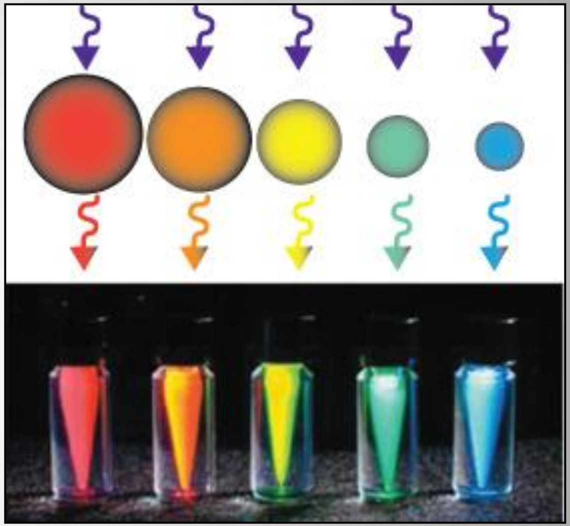
$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = \frac{2n+1}{2m}\left(\frac{\pi\hbar}{a}\right)^2$$

$$\frac{\Delta E_n}{E_n} = \frac{2n+1}{n^2} \sim \frac{2}{n}$$

$\boldsymbol{m}=10^{-27}\,kg,\ \boldsymbol{a}=0.1m:\quad \boldsymbol{\Delta E/n}\sim 6.8\times10^{-20}$ eV;

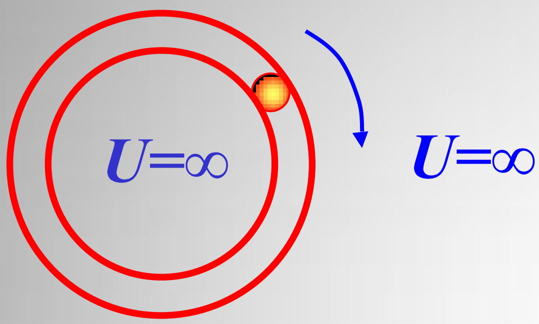
$\boldsymbol{m}=0.9\times10^{-30}\,kg,\ \boldsymbol{a}=10^{-10}\,m:\quad \boldsymbol{\Delta E/n}\sim 75$ eV;

Квантовые точки



Квантовая точка — фрагмент проводника или полупроводника, ограниченный по всем трём пространственным измерениям и содержащий электроны проводимости. Точка должна быть настолько малой, чтобы были существенны квантовые эффекты.

Движение частицы по окружности



$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi}{dx^2}+U(x)\Psi=E\Psi$$

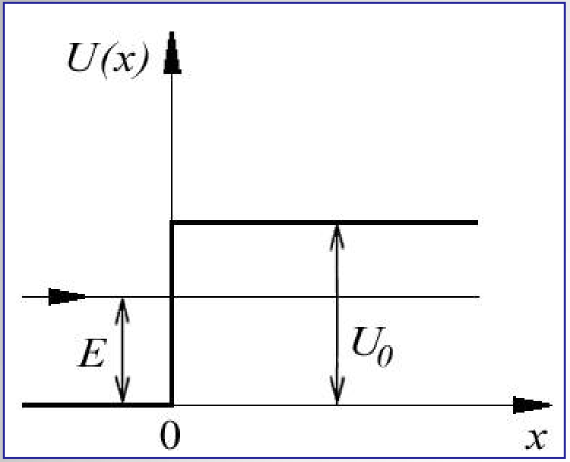
$$\frac{d^2\Psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}E\Psi=0,\quad \Psi(x)=\Psi(x+a)$$

$$\Psi(x)=\exp(ikx),\quad k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$\Psi(x)=\Psi(x+a)\to\exp(ika)=1\to k=\frac{2\pi}{a}n,\ \ n=1,2\ldots$$

$$\Psi_n(x)=\frac{1}{\sqrt{a}}\exp\left(i\frac{2\pi n}{a}x\right),\quad E=\frac{2}{m}\left(\frac{\pi\hbar}{a}n\right)^2$$

Частица в области потенциального порога



$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi}{dx^2}+U(x)\Psi=E\Psi$$

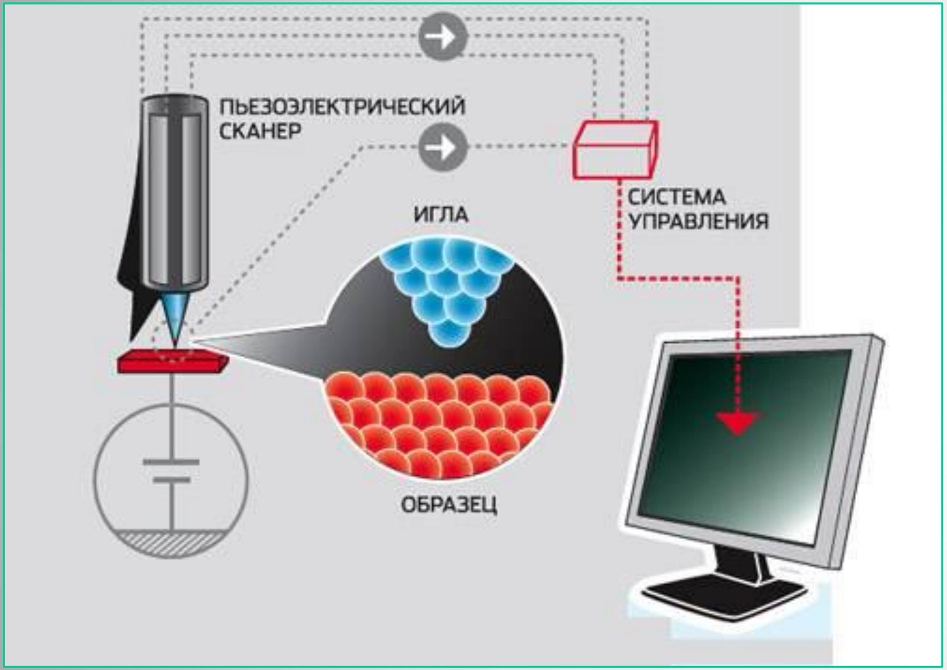
$$U(x)=\begin{cases}0, & x<0\\ U_0, & x>0\end{cases}$$

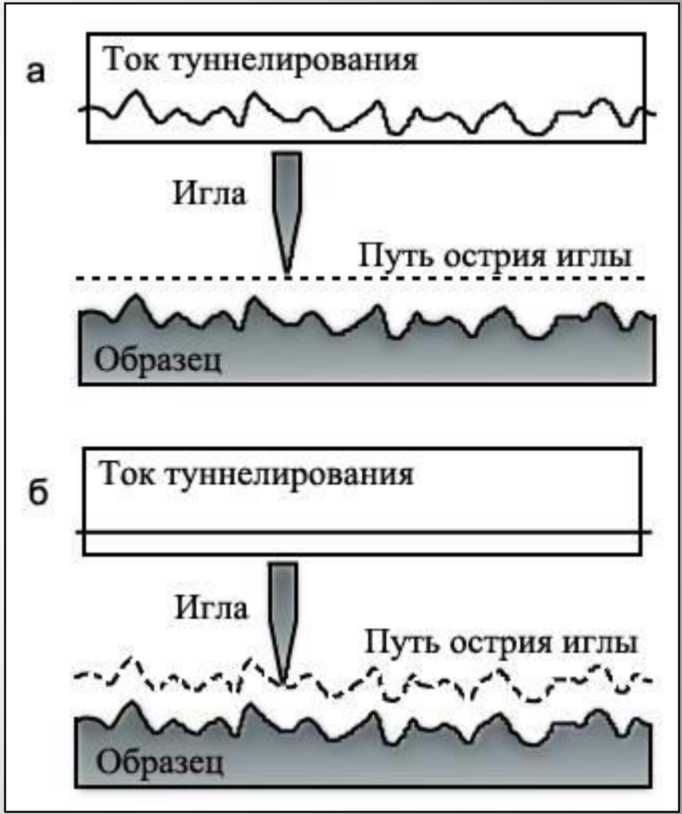
$$\frac{d^2\Psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-U_0\right)\Psi=0$$

$$\Psi=A\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m\left(U_0-E\right)}x\right),\quad x>0$$

Сканирующий туннельный микроскоп

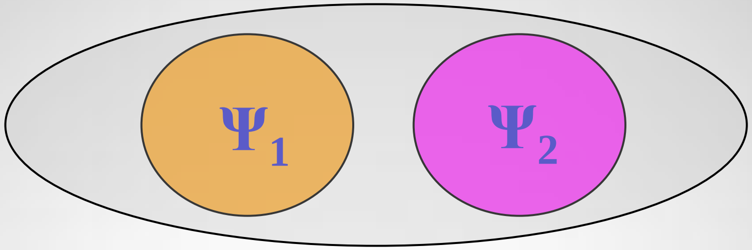
Г. Биннинг, Х. Ререр (нобелевская премия по физике, 1986 г.)



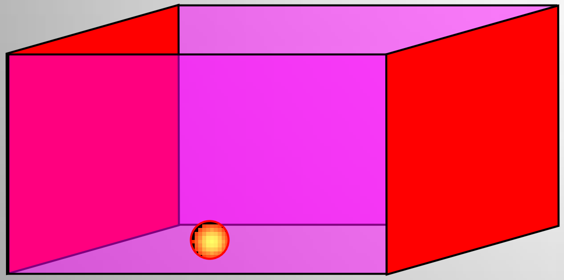


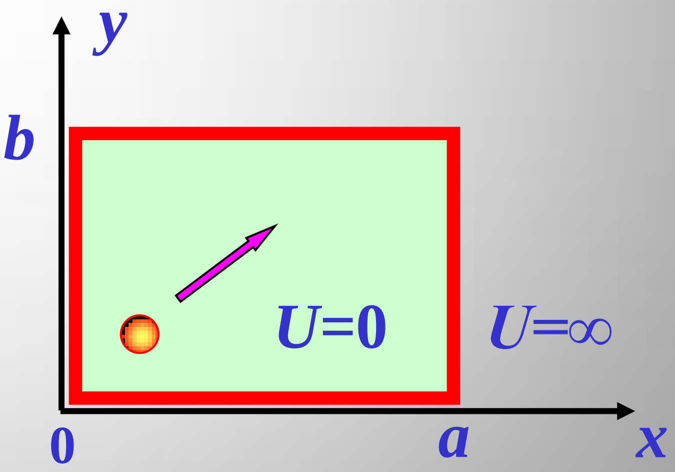
Область применения: нанотехнология

Частица в прямоугольной потенциальной яме (два измерения)



$$\Psi_{12}(\mathrm{r}_1, \mathrm{r}_2, t) = \Psi_1(\mathrm{r}_1, t) \times \Psi_2(\mathrm{r}_2, t)$$





Разделение переменных

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

$$\boldsymbol{U}(\boldsymbol{x})=\begin{cases}0, & 0<\boldsymbol{x}<\boldsymbol{a},\,0<\boldsymbol{y}<\boldsymbol{b}\\ & \infty\end{cases} \Rightarrow \begin{cases}\Psi(x,0)=\Psi(x,b)=0\\ \Psi(0,y)=\Psi(a,y)=0\end{cases}$$

$$\Psi(x,y)=R(x)\Phi(y)\rightarrow\begin{cases}R(0)=R(a)=0\\ \Phi(0)=\Phi(b)=0\end{cases}$$

$$\Phi\frac{d^2R}{dx^2}+R\frac{d^2\Phi}{dy^2}+\frac{2mE}{\hbar^2}R\Phi=0\rightarrow\frac{1}{R}\frac{d^2R}{dx^2}+\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{dy^2}+\frac{2mE}{\hbar^2}=0$$

Энергетический спектр

$$\frac{1}{R}\frac{d^2R}{dx^2} = -\omega^2, \quad \frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{dy^2} + k^2 = \omega^2, \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$\begin{cases} \dfrac{d^2R}{dx^2} + \omega^2 R = 0 \\ \dfrac{d^2\Phi}{dy^2} + (k^2 - \omega^2)\Phi = 0 \end{cases} \rightarrow \begin{cases} R = a_1 \sin(\omega x) \\ \Phi = a_2 \sin\left(y\sqrt{k^2 - \omega^2}\right) \end{cases}$$

$$E_n = \frac{(\pi\hbar)^2}{2m}\left[\left(\frac{n}{a}\right)^2 + \left(\frac{l}{b}\right)^2\right], \quad n, l = 1, 2, 3\ldots$$

$$\Psi_{l,n}(x, y) = \frac{2}{\sqrt{ab}}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\sin\left(\frac{l\pi}{b}y\right)$$

Квантовый гармонический осциллятор

$$U(x)=\frac{Kx^2}{2}=\frac{m\omega^2x^2}{2}\ \rightarrow\ \frac{d^2\Psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-\frac{m\omega^2x^2}{2}\right)\Psi=0$$

Асимптотическое поведение решения

$$z=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x\ \rightarrow\ \Psi''+\left(\frac{2E}{\hbar\omega}-z^2\right)\Psi=0;\ \ z>>0\ \rightarrow\ \Psi\sim\exp\left(-\frac{z^2}{2}\right)$$

Уравнение Эрмита

$$\Psi(z)=\exp\left(-\frac{z^2}{2}\right)\chi(z)\ \rightarrow\ \frac{d\Psi}{dz}=\Psi'=-z\Psi+\exp\left(-\frac{z^2}{2}\right)\chi'$$

$$\chi''-2z\chi'+\left(\frac{2E}{\hbar\omega}-1\right)\chi=0$$

Энергетический спектр квантового гармонического осциллятора

$$\chi'' - 2z\chi' + 2n\chi = 0, \ \ 2n = \frac{2E}{\hbar\omega} - 1$$

Ψ удовлетворяет условиям регулярности если *n* целое число

$$2n = \frac{2E}{\hbar\omega} - 1 \ \rightarrow \ E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \ \ n = 0, 1, 2\ldots$$

Полиномы Эрмита $H_n(z)$

$$\chi_n \sim H_n(z), \ \ H_0(z) = 1, \ \ H_1(z) = 2z, \ \ H_2(z) = 4z^2 - 2, \ldots$$

$$n = 0 \ \ \rightarrow \ \ E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}, \ \ \Psi_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right)$$

Квантовый и классический гармонические осцилляторы : основные различия

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

$$E = \frac{m\omega^2 x^2}{2},\ \omega = \sqrt{\frac{K}{m}}$$

$$E_{n+1} - E_n = \hbar\omega,\ \ n = 0, 1, 2\ldots$$

$$\lim_{\Delta x\to 0}(E) = 0$$

Эквидистантный дискретный спектр

Непрерывный спектр

$$\min(E) = E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

$$\min(E) = 0$$

Нулевые колебания

Нет нулевых колебаний

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

$$x = 0$$