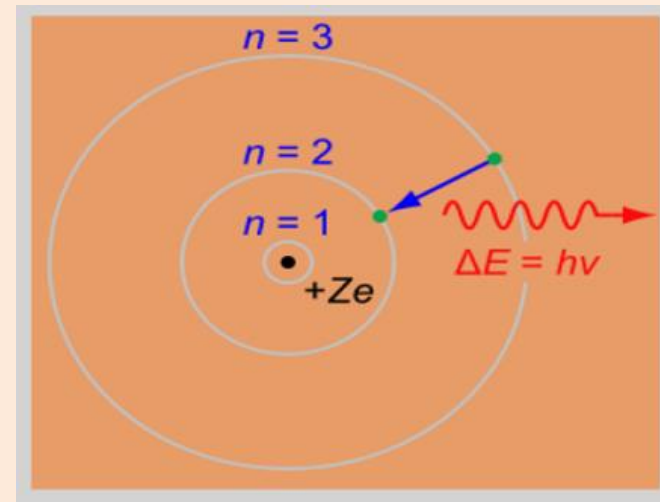


Лекція 5

Деякі приклади розв'язків рівняння Шредінгера

План.

1. Одномірний рух вільної частинки.
2. Трьохмірний рух вільної частинки.
3. Рух частинки в одномірній потенціальній ямі.
4. Одномірний потенціальний бар'єр.
5. Лінійний гармонічний осцилятор.



I. Одномірний рух вільної частинки

Вільною називається частинка, потенціальна енергія якої в будь-якій точці простору однакова ($V = \text{const}$)

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} &= -\frac{1}{\hbar^2} \mathbf{P}_x^2 \Phi \rightarrow \mathbf{P}_x \Phi = -i\hbar \frac{\partial \Phi}{\partial x} \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Phi &= E\Phi, \quad \Delta \Phi = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} \\ \Phi(\mathbf{r}, t) &= \Psi(\mathbf{r}) \Omega(t) \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi = E\Psi\end{aligned}$$

Якщо частинка рухається в потенціальному полі, то можна записати:

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

Одномірний рух вільної частинки

Загальний розв'язок рівняння:

$$\Psi(x) = c_1 e^{ikx} + c_2 e^{-ikx},$$

Дана функція є суперпозицією двох хвиль (формула Ейлера):

$$e^{ikx} = \cos kx + i \sin kx; \quad e^{-ikx} = \cos kx - i \sin kx.$$

В найпростішому випадку припустимо $c_1 = c_2$, тоді:

$$\Psi(x) = c \cdot \cos kx = c \cdot \cos \left[\sqrt{2mE} \frac{x}{\hbar} \right].$$

Оскільки ніяких обмежень на E (окрім $E > 0$) не накладається, енергетичний спектр **частинок неперервний**.

Якщо $(2mE)^{1/2} = p_x$, тоді:

$$\Psi(x) = c_1 \exp \left[\frac{i}{\hbar} p_x \cdot x \right] + c_2 \exp \left[-\frac{i}{\hbar} p_x \cdot x \right].$$

Аналогія до класичної механіки:

- Енергія та імпульс:

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

- Класична енергія атома He:

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

- Гамільтоніан атома He:

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

II. Трьохмірний рух вільної частинки.

- Рівняння Шредінгера має вигляд:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi = E\Psi.$$

розв'язок :

$$\Psi(x, y, z) = c_1 \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\vec{p} \cdot \vec{r})\right] + c_2 \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(\vec{p} \cdot \vec{r})\right].$$

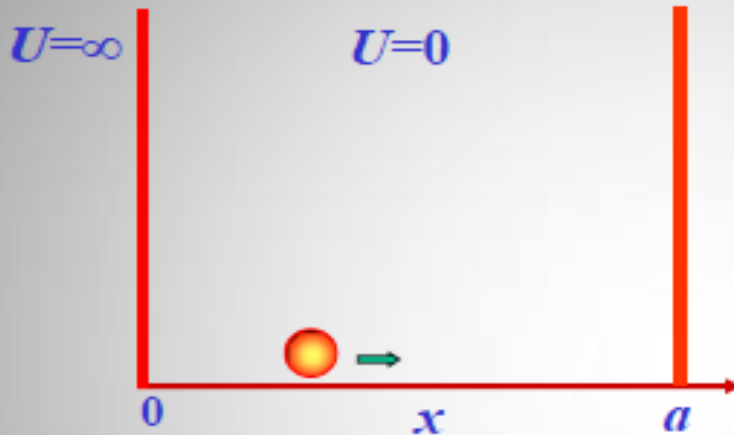
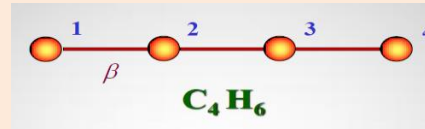
енергія частинок має неперервний спектр

значення $E=p^2/2m$.



III. Рух частинки в потенціальній ямі.

Приклад - полієнова послідовність, в межах якої електрон спряженої системи може вільно пересуватися лише вздовж карбонового ланцюга .



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

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

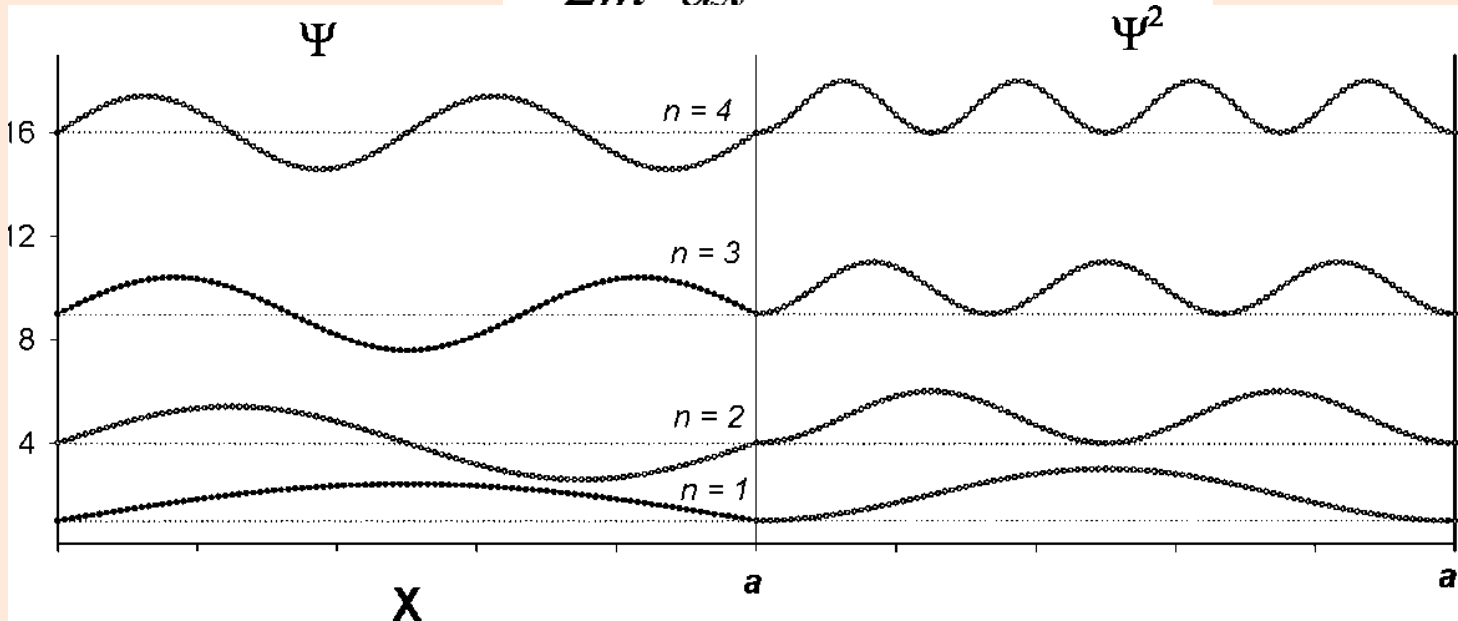
$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\Psi = 0, \quad \Psi(0) = \Psi(a) = 0$$

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

Вузлові точки

- За межами ями рівняння Шредінгера має вигляд:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} + \infty\Psi = E\Psi,$$



Вигляд хвильової функції (ψ) та густини ймовірності (ψ^2)
за різних значень n

IV. Одномірний потенціальний бар'єр.

Рух частинки ускладнений через прямокутний потенціальний бар'єр висотою V_0 , тобто:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{при } x < 0 & (1) \\ V_0 & \text{при } 0 \leq x \leq l & (2) \\ 0 & \text{при } x > l & (3) \end{cases}$$

Рівняння Шредінгера розпадеться на такі:

$$\begin{aligned} \Psi_1(0) = \Psi_2(0), \quad \left(\frac{d\Psi_1}{dx} \right)_{x=0} &= \left(\frac{d\Psi_2}{dx} \right)_{x=0}, \\ \Psi_2(l) = \Psi_3(l), \quad \left(\frac{d\Psi_2}{dx} \right)_{x=l} &= \left(\frac{d\Psi_3}{dx} \right)_{x=l}. \end{aligned}$$

Одномірний потенціальний бар'єр.

Роз'язок трьох рівнянь можна записати:

$$\Psi_1(x) = Ae^{ik_0x} + Be^{-ik_0x},$$

$$\Psi_2(x) = \alpha e^{ikx} + \beta e^{-ikx},$$

$$\Psi_3(x) = ae^{ik_0x} + be^{-ik_0x},$$

$$k_0^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad k^2 = \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}.$$

З граничних умов, отримаємо чотири рівняння з шістьма невідомими:

$$A + B = \alpha + \beta$$

$$ik_0(A - B) = ik(\alpha - \beta)$$

$$\alpha \cdot e^{ikl} + \beta \cdot e^{-ikl} = a \cdot e^{ik_0l} + b \cdot e^{-ik_0l}$$

$$ik(\alpha \cdot e^{ikl} - \beta \cdot e^{-ikl}) = ik_0(a \cdot e^{ik_0l} - b \cdot e^{-ik_0l})$$

Накладання обмежень

Якщо частинка рухається до бар'єру зліва, то ймовірність виявити частинку, що рухається до бар'єру справа - рівна нулю, $b = 0$

$A \cdot \exp(ik_0x)$ – хвиля, що падає; $B \cdot \exp(-ik_0x)$ – відбита хвиля, нехай $A = 1$

Отже, маємо систему рівнянь :

$$\begin{aligned}1 + B &= \alpha + \beta \\1 - B &= (k/k_0)(\alpha - \beta) \\ \alpha \cdot e^{ikl} + \beta \cdot e^{-ikl} &= a \cdot e^{ik_0l} \\ (k/k_0)(\alpha \cdot e^{ikl} - \beta \cdot e^{-ikl}) &= a \cdot e^{ik_0l}\end{aligned}$$

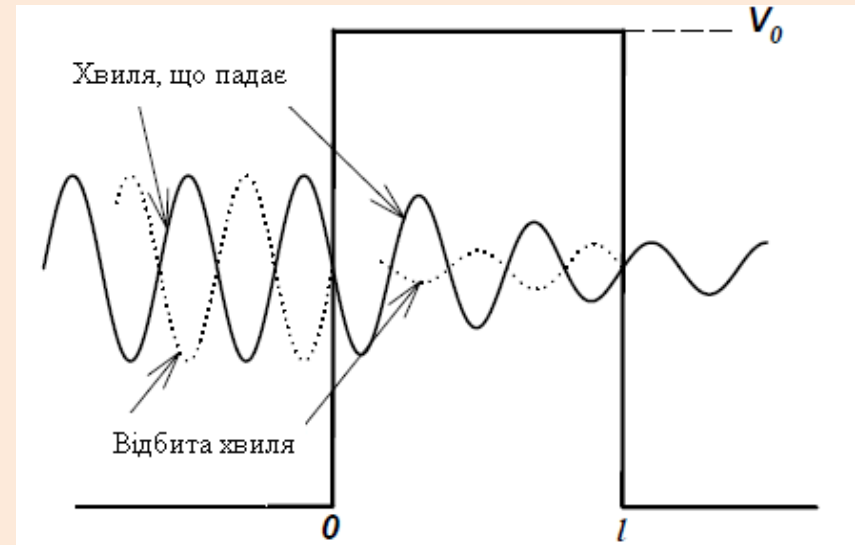
Ні один із коефіцієнтів B , a , β , α не перетворюється в 0.

Це означає, що і ймовірність виявити частинку при будь-яких x не рівна нулю, в тому числі при $0 < x < l$ (всередині бар'єру) і при $x > l$ (справа від бар'єру).

Висновок отримано незалежно від співвідношення E та V_0 ,

Тунельний ефект

- Явище кінцевої ймовірності проходження частини крізь потенціальний бар'єр називається *тунельним ефектом*.



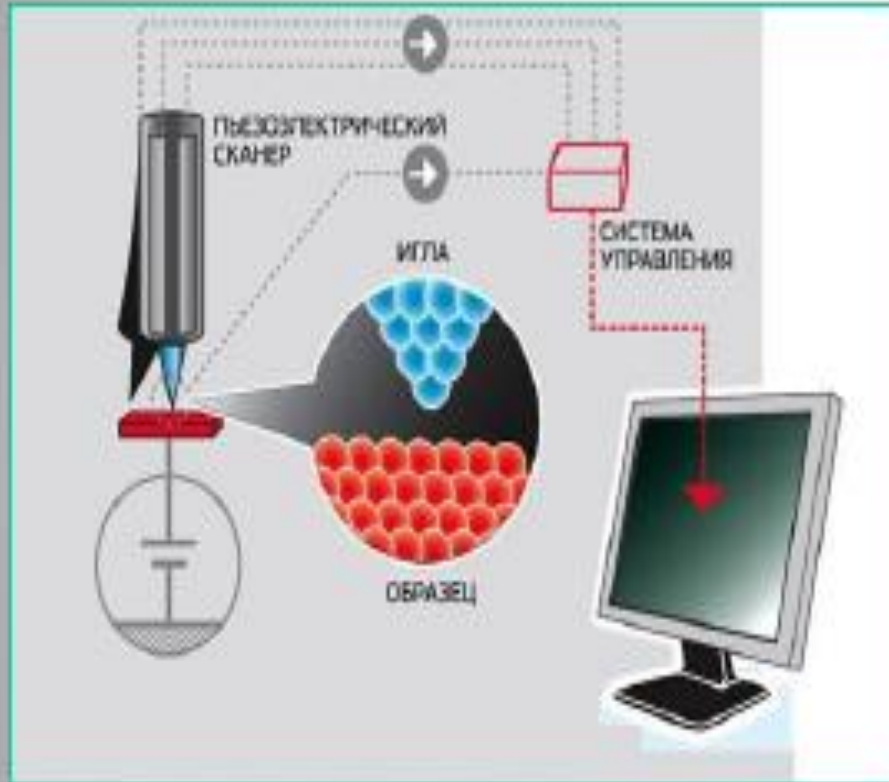
Коефіцієнт відбивання $R = |B|^2/|A|^2 = |B|^2$.

Коефіцієнт прозорості бар'єру $D = |a|^2/|A|^2 = |a|^2$.

У випадку $E < V_0$:
$$D = D_0 \exp\left[-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)} \cdot l\right].$$

При $E > V_0$ спостерігається *надбар'єрне відбивання*.

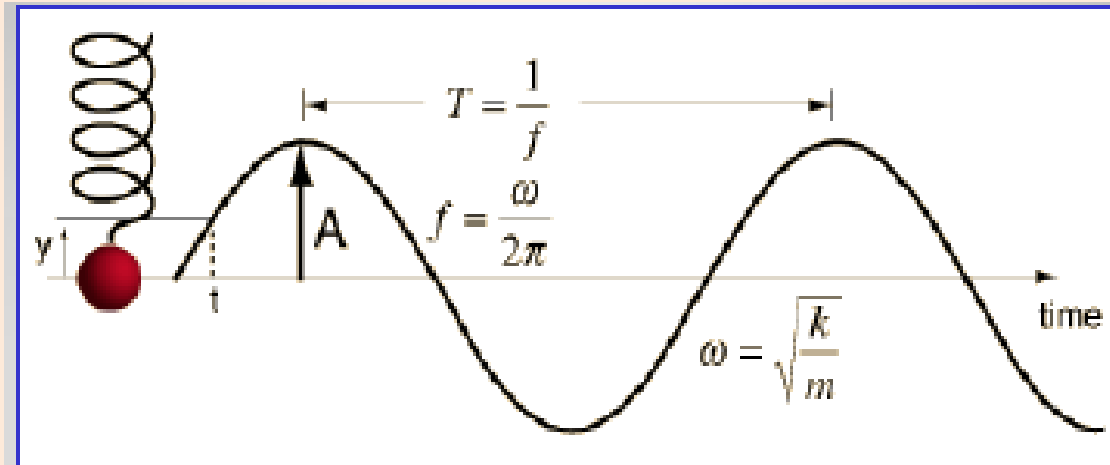
Скануючий тунельний мікроскоп



Сфера застосування – нанотехнології



Гармонійні коливання



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

Аналогія з плоскою гармонійною хвилею

- Звичайна хвиля

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

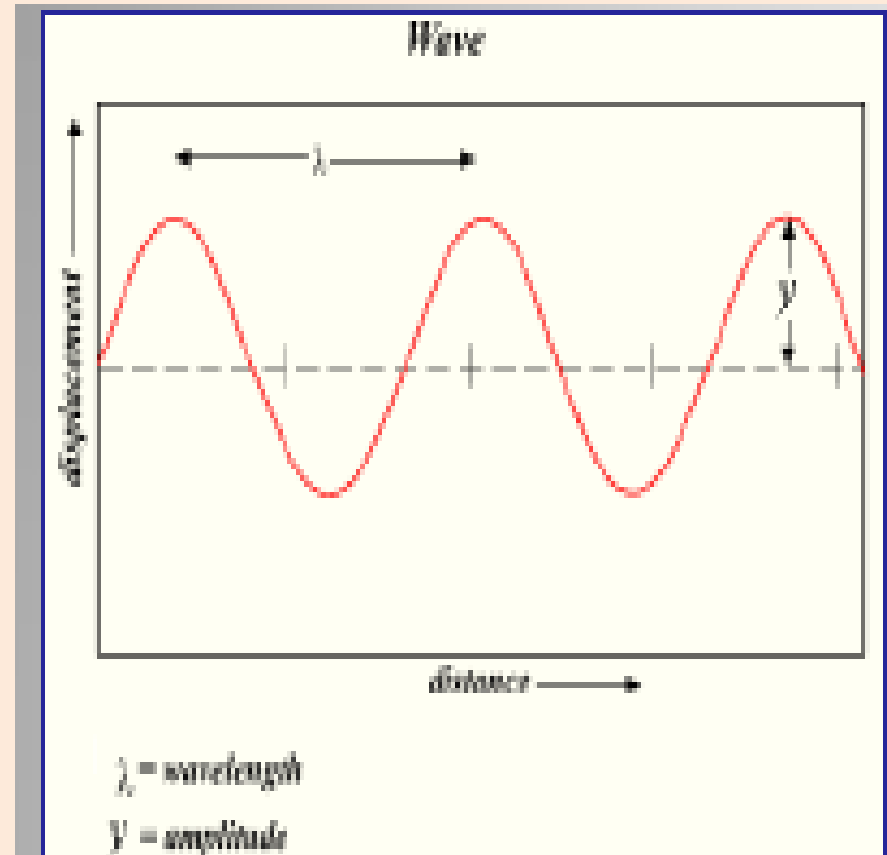
$$E = \hbar\omega$$

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

- Хвиля де Бройля

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

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



V. Лінійний гармонічний осцилятор.

Функція Гамільтона для лінійного гармонічного осцилятора :

$$H = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{kx^2}{2} = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{m\omega_0^2 x^2}{2}.$$

Хвильове рівняння:
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{m\omega_0^2}{2} x^2 \Psi = E\Psi.$$

При $n=1$:
$$E_1 = \frac{3\hbar\omega_0}{2},$$

В загальному вигляді:
$$E_n = \hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Відмінності між квантовим та класичним гармонійними осциляторами

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

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

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

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

Дискретний спектр

Неперервний спектр

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

$$\min(E) = 0$$

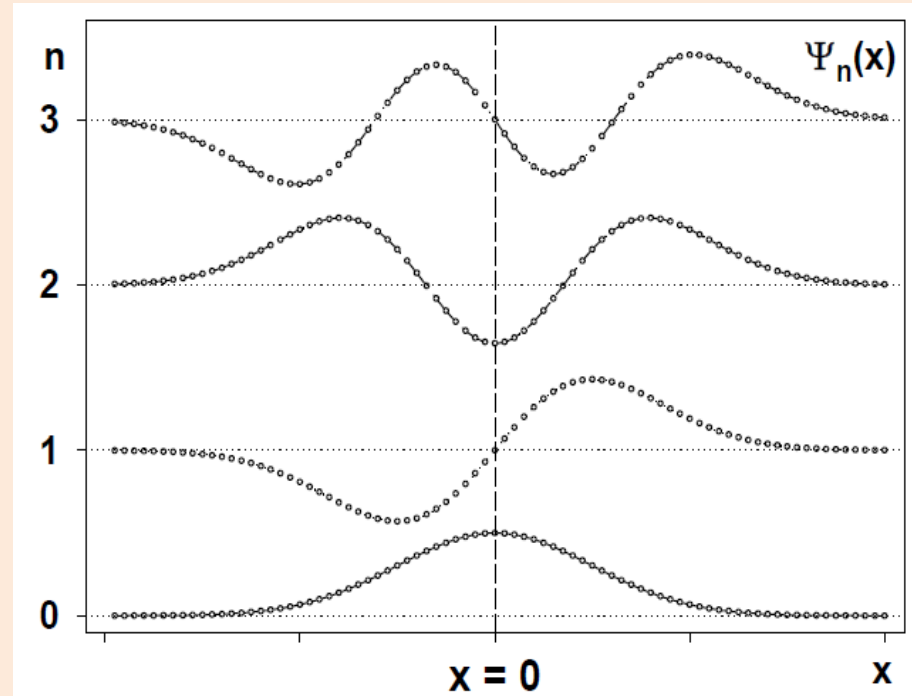
Нульові коливання

Нема нульових коливань

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

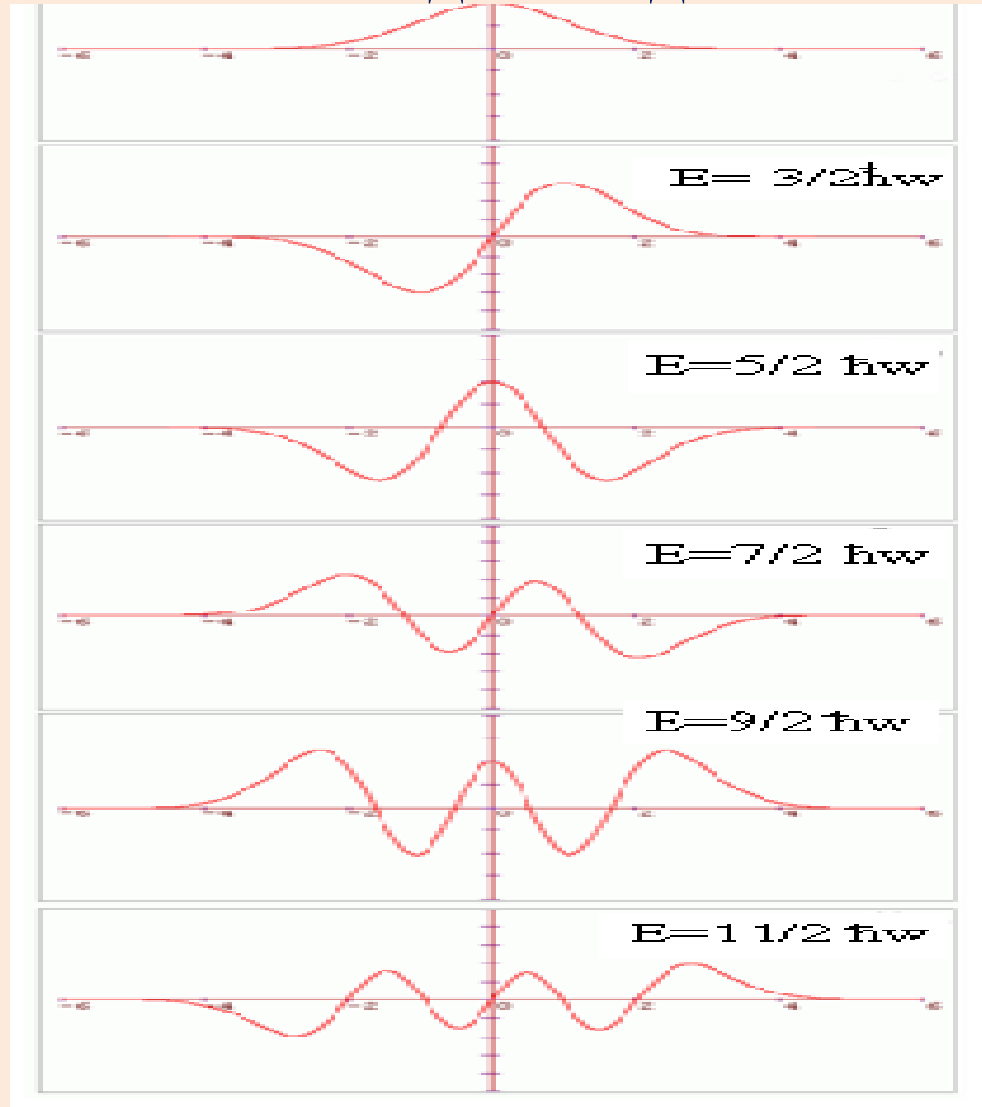
$$x = 0$$

Графіки власних функцій гармонічного осцилятора



n – к-сть вузлів, тобто точок в яких хвильова функція міняє знак.

Хвильові функції перших шести станів із квантовими числами від $n = 0$ до 5.



Дякую за увагу!

