

Тема 4. Квантовый анализ движения некоторых объектов

П.1. Примеры решения для частицы в яме.

П.2. Квантовый осциллятор.

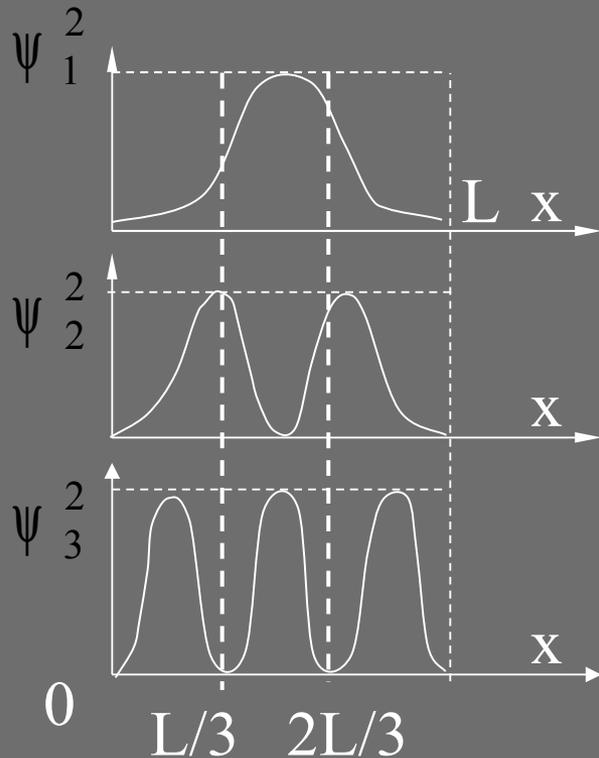
П.3. Квантовый ротатор.

**П.4. Прохождение частицы через потенциальный барьер.
Туннельный эффект.**

П.1. Примеры решения для частицы в яме.

ЗАДАЧА: Найти вероятность пребывания частицы в средней трети ямы для первых трех состояний.

Запишем ВФ для трех состояний: $\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\pi \frac{x}{L}\right), \dots$



Из рисунка хорошо видно, что для третьего состояния в каждой трети ямы вероятность пребывания одна и та же, следовательно,

$$P(0 < x < L/3, L/3 < x < 2L/3) = 1/3 = 0.33.$$

т.к. вероятность $P(\text{в яме}) = 1$.

Остальные случаи требуют подробного интегрирования.

Первое состояние:

$$\begin{aligned} I(\psi_1) &= \int_{\frac{L}{3}}^{\frac{2L}{3}} \left(\frac{2}{L} \right) \sin^2 \left(\pi \frac{x}{L} \right) dx = \frac{2}{2L} \int_{\frac{L}{3}}^{\frac{2L}{3}} dx - \frac{2}{2L} \int_{\frac{L}{3}}^{\frac{2L}{3}} \cos \left(2\pi \frac{x}{L} \right) dx = \\ &= \frac{1}{L} \left[\frac{L}{3} - \frac{L}{2\pi} \sin \left(2\pi \frac{x}{L} \right) \right]_{\frac{L}{3}}^{\frac{2L}{3}} = \frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi} \left(\sin \frac{4\pi}{3} - \sin \frac{2\pi}{3} \right) = \\ &= 0.33 - \frac{1}{2\pi} (\sin 240^\circ - \sin 120^\circ) = \\ &= 0.33 + \frac{1}{\pi} \sin 60^\circ = 0.609. \end{aligned}$$

Ответ: вероятность пребывания частицы в средней трети ямы

для первого состояния 0.609,

для второго 0.18 (получить самостоятельно, СРС),

для третьего 0.33.

ТЕСТ

П.2. Квантовый осциллятор.

Проблема: Как отражаются квантовые закономерности на колебательном движении тела?

Известно, что колебательное движение возможно, если на тело действует упругая сила, а потенциальная энергия тела меняется, как квадрат координаты.

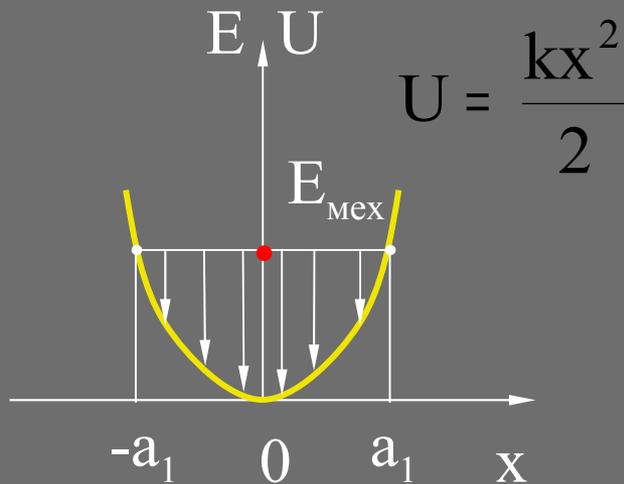
Квантовый осциллятор – это частица, находящаяся в параболической потенциальной яме.

Параболической потенциальной ямой называется область пространства, в которой потенциальная энергия частицы является квадратичной функцией координаты

$$U = \frac{kx^2}{2}.$$

Классическое решение:

$$F_{\text{упр}} = -kX .$$



Решение динамического уравнения (II закон Ньютона) дает нам гармонический закон движения

$$x(t) = a \cdot \sin(\omega_0 t + \varphi_0),$$

где частота собственных колебаний

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}.$$

Скорость $V = \frac{dx}{dt} = a \cdot \omega_0 \cos(\omega_0 t + \varphi_0),$

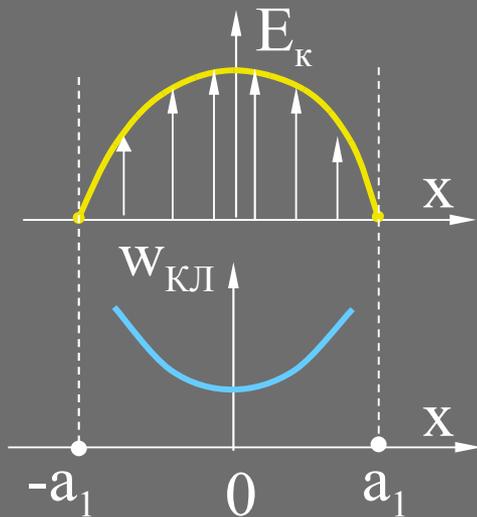
Кинетическая энергия

$$E_{\text{кин}} = \frac{mV^2}{2}.$$

Полная механическая энергия

$$E_{\text{мех}} = E_{\text{к}} + U = \text{const.}$$

Изобразим на рисунке, как меняется кинетическая энергия:



Плотность вероятности $w_{кЛ}$ обнаружения частицы в яме резко растет к концам параболы, т.е. к точкам поворота.

Решение квантовой задачи. Решается уравнение Шредингера:

$$\frac{d^2\psi}{dt^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} \left(E - \frac{kx^2}{2} \right) \psi = 0.$$

Решение этого уравнения записывается с помощью полиномов Чебышева-Эрмита $H_n(x)$, которые табулированы, или выражаются через элементарные функции.

Основные свойства
квантового осциллятора:

1) Его энергия квантуется

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \underbrace{\hbar\omega_0}_{h\nu_0}$$

где $n = 0, 1, 2, \dots$

2) Имеется минимальный ненулевой уровень энергии

$$E_0 = \frac{\hbar\omega_0}{2}, \quad \text{где} \quad \omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}.$$

Состояние осциллятора, имеющего « E_0 » называется нулевыми колебаниями.

ТЕСТ

ТЕСТ

3) Плотность вероятности нигде не равна 0, а только асимптотически приближается к 0 при $X \rightarrow \pm \infty$, т.е. выходит за точки поворота, в зону отрицательных кинетических энергий.

Следствие: Существует вероятность обнаружения частицы за точками поворота.

Явление, связанное с конечной вероятностью нахождения частицы в области отрицательной кинетической энергии, называется туннельным эффектом.

4) Уровни энергии расположены эквидистантно (на равных расстояниях). Расстояние между уровнями

$$E_n - E_{n-1} = \hbar\omega_0 = h\nu_0$$

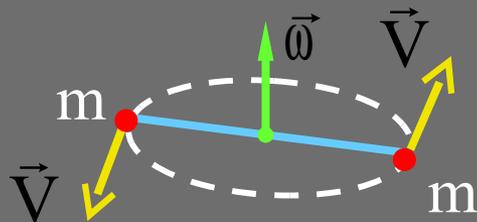
(энергия фотона?).

П.3. Квантовый ротатор.

Проблема: Как отражаются квантовые закономерности на вращающемся теле?

Квантовым ротатором называется свободно вращающееся тело, подчиняющееся квантовым закономерностям.

Известно: Простейшей моделью тела является «гантель» - включающая 2 одинаковые материальные точки, соединенные абсолютно тонким, жестким и невесомым стержнем.



Момент инерции двух МТ и гантели:

$$I = 2mr^2.$$

$$E_{\text{вр}} = \frac{I\omega^2}{2} = \frac{L^2}{2I}$$

- кинетическая энергия вращающегося тела.

Момент импульса:
$$\vec{L} = I\vec{\omega}.$$

Учтем закономерности квантовой механики.

Модель квантовый ротатор в квантовой механике анализируется с помощью уравнения Шредингера в полярных координатах (за рамками нашего курса). Перечислим основные результаты.

Модуль момента импульса квантуется (принимает значения из дискретного ряда чисел),
 $|\vec{L}|_l = \hbar \sqrt{l(l+1)}$,

где целое число $l = 0, 1, 2, 3 \dots$ - квантовое число ротатора.

Замечание: Скорости шариков много меньше скорости света, т.е. $V \ll c$.

Вывод: $E_l^{BP} = \frac{\hbar^2}{2I} l(l+1)$ - формула квантования энергии квантового ротатора.

Замечание: Эта модель применяется для моделирования вращающихся молекул.

П.4. Прохождение частицы через потенциальный барьер. Туннельный эффект.

Изучите самостоятельно явление взаимодействия частицы с потенциальным барьером. Выпишите волновые функции частицы вне и внутри барьера.

Ознакомьтесь с туннельным эффектом.

СРС - 2 стр. Законспектируйте материал, используя учебник.

ТЕСТ

ТЕСТ

ТЕСТ