8. Свободное движение частицы. Частица в потенциальной яме. Энергетический спектр гармонического осциллятора.

Свободное движение частицы в пустом пространстве, где во всех точках потенциальную энергию частицы можно положить равной нулю, описывается следующим **нестационарным уравнением Шредингера**

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right),$$

где ψ - волновая функция частицы, $\hbar=h/2\pi$, $h=6,62\cdot10^{-34}$ Дж·с - постоянная Планка, m – масса частицы.

Простейшее решение этого уравнения, соответствующее стационарному состоянию частицы с энергией E и импульсом $\vec{p}$, имеет вид:

$$\psi=Ce^{i\cdot\left(\frac{\vec{p}\vec{r}}{\hbar}-\frac{Et}{\hbar}\right)},$$

где C – нормировочная постоянная, и называется **волной де Бройля**. Согласно уравнению Шредингера энергия E и импульс свободной частицы $\vec{p}$ связаны между собой хорошо известным соотношением нерелятивистской механики

$$E=\frac{p^2}{2m}.$$

По аналогии с плоской монохроматической волной волну де Бройля можно записать следующим образом

$$\psi=Ce^{i\left(\vec{k}\vec{r}-\omega t\right)}$$

где $\vec{k}=\vec{p}/\hbar$, $\omega=E/\hbar$, и ввести **длину волны де Бройля**

$$\lambda_B=\frac{2\pi}{k}=\frac{h}{p}=\frac{h}{\sqrt{2mE}}.$$

Длина волны де Бройля есть характерный пространственный масштаб квантовых явлений для частицы с массой m и энергией E в микромире. Если размер пространственной области, где протекает физический процесс, порядка или меньше длины волны де Бройля, то для его описания необходимо использовать законы квантовой физики.

Задача №25

Определить длину волны де Бройля λ_B для электрона, протона и частицы массой $m = 10^{-6}$ кг, движущихся с одинаковой скоростью $\upsilon = 100$ м/с. Масса электрона $m_e = 9{,}1 \cdot 10^{-31}$ кг, масса протона $m_p = 1{,}6 \cdot 10^{-27}$ кг, постоянная Планка $h = 6{,}6 \cdot 10^{-34}$ Дж·с.

Решение

Используя формулу для длины волны де Бройля

$$\lambda_B = \frac{h}{p} = \frac{h}{m\upsilon}, \qquad (1)$$

получаем, что для электрона

$$\lambda_{B1} = \frac{6{,}6 \cdot 10^{-34}}{9{,}1 \cdot 10^{-31} \cdot 100} = 7 \cdot 10^{-6}\text{ м}, \qquad (2)$$

для протона

$$\lambda_{B2} = \frac{6{,}6 \cdot 10^{-34}}{1{,}6 \cdot 10^{-27} \cdot 100} = 4 \cdot 10^{-9}\text{ м}, \qquad (3)$$

и для частицы

$$\lambda_{B3} = \frac{6{,}6 \cdot 10^{-34}}{10^{-6} \cdot 100} = 6{,}6 \cdot 10^{-30}\text{ м}. \qquad (4)$$

Отметим, что в случае макроскопической частицы длина волны де Бройля λ_{B3} на много порядков меньше линейных размеров самой частицы, что исключает практическую необходимость применения законов квантовой физики для описания её движения.

Ответ: $\lambda_{B1} = 7 \cdot 10^{-6}$ м, $\lambda_{B2} = 4 \cdot 10^{-9}$ м, $\lambda_{B3} = 6{,}6 \cdot 10^{-30}$ м.

Задача №26

Определить энергию E стационарных состояний частицы массой m в бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме шириной L (см. рис.1). Чему равна величина средней скорости $\upsilon_{\text{ср}}$, с которой частица движется внутри потенциальной ямы?

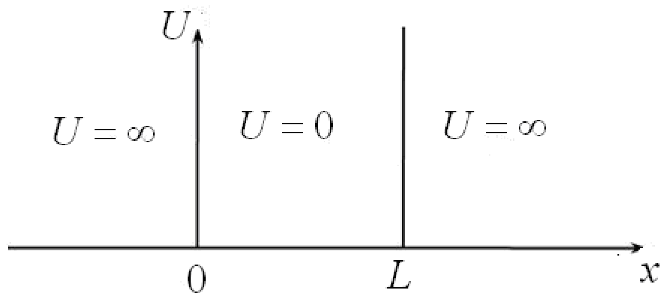

Рис. 1

Решение

Запишем стационарное уравнение Шредингера для частицы с массой m и энергией E, движущейся в потенциальном поле $U(x)$,

$$E\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + U(x)\psi\,. \tag{1}$$

Отметим, что в отличие от законов движения классической динамики частицы уравнение (1) не содержит силу, действующую на частицу.

В областях $x < 0$ и $x > L$, где потенциальная энергия частицы бесконечно большая, вероятность нахождения частицы с любой конечной энергией $E < \infty$ равна нулю, поэтому следует положить

$$\psi = 0\,, \tag{2}$$

если $x \le 0$ или $x \ge L$.

Для определения энергии E стационарных состояний частицы, т.е. энергии, которая сохраняется постоянной при движении частицы, необходимо решить уравнение

$$E\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} \tag{3}$$

в интервале $0 < x < L$ при двух граничных условиях для волновой функции

$$\psi(0) = \psi(L) = 0\,. \tag{4}$$

Уравнение (3) удобно переписать следующим образом:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0\,, \tag{5}$$

где $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$. Решение уравнения (5), удовлетворяющее граничным условиям (4), запишется в виде:

$$\psi = C\sin kx\,, \tag{6}$$

где C – нормировочная постоянная.

Граничные условия (4) выполняются, если

$$k_n L = \pi n\,,\ n = 1, 2, \dots\ . \tag{7}$$

Отсюда находим, что энергетический спектр E_n частицы в рассматриваемой потенциальной яме описывается выражением

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2\,,\ n = 1, 2, \dots\ . \tag{8}$$

Это дискретный спектр, т.е. энергия частицы в потенциальной яме квантуется, причем энергия частицы в основном состоянии при $n = 1$ отлична от нуля:

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} > 0\ . \tag{9}$$

В потенциальной яме частица обладает только кинетической энергией, поэтому согласно (9) частица не может находиться в состоянии покоя и занимать определенное положение в пространстве. Этот вывод справедлив при любом ограничении области возможного нахождения частицы.

По условию нормировки волновой функции

$$\int_0^L \psi_n^2 dx = C^2 \int_0^L \sin^2 k_n x dx = C^2 \int_0^L \frac{1 - \cos 2k_n x}{2} dx = C^2 \frac{L}{2} = 1$$

и

$$C = \sqrt{\frac{2}{L}}\ . \tag{10}$$

Это условие нормировки означает, что вероятность нахождения частицы в потенциальной яме равна 1.

Полная волновая функция стационарного состояния частицы с энергией E_n имеет вид:

$$\psi_n(x,t) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\sqrt{\frac{2mE_n}{\hbar^2}} x \right) e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}\,,\ n = 1, 2, \dots\ . \tag{11}$$

В стационарном состоянии (11) среднее значение импульса частицы равно нулю

$$\left\langle p_x \right\rangle = 0\ , \tag{12}$$

а среднее значение квадрата импульса отлично от нуля и находится с помощью уравнения

$$\frac{\left\langle p_x^2 \right\rangle}{2m} = E_n$$

или

$$\left\langle p_x^2 \right\rangle = 2mE_n. \tag{13}$$

Отсюда можно оценить величину средней скорости, с которой движется частица внутри потенциальной ямы

$$\left\langle p_x^2 \right\rangle = \left\langle m^2 \upsilon_x^2 \right\rangle = m^2 \left\langle \upsilon_x^2 \right\rangle = 2mE_n \tag{14}$$

или

$$\upsilon_{x.\text{ср}} = \sqrt{\left\langle \upsilon_x^2 \right\rangle} = \sqrt{\frac{2E_n}{m}}. \tag{15}$$

Из формулы (8) видно, что энергетический спектр частицы зависит от геометрического размера ямы L. Этот эффект называется **пространственным квантованием** и используется для управления энергетическим спектром наноструктур с линейными размерами порядка 10нм. Такие структуры, ограниченные в трехмерном пространстве, называются квантовыми точками и применяются, например, для создания одноэлектронных транзисторов.

Ответ: $E_n = \dfrac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2$, $n = 1, 2, \ldots$; $\upsilon_{x.\text{ср}} = \sqrt{\dfrac{2E_n}{m}}$.

Задача №27

Оценить эффективную температуру $T_{\text{эф}}$ нулевых колебаний в основном состоянии гармонического осциллятора с частотой собственных колебаний $\omega = 10^{15}$ рад/с .

Решение

Из решения стационарного уравнения Шредингера следует, что энергетический спектр механического гармонического осциллятора с потенциальной энергией

$$U(x) = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2, \tag{1}$$

где $k > 0$ – постоянная, m – масса частицы, $\omega = \sqrt{k/m}$ – частота собственных колебаний осциллятора и x – смещение частицы относительно ее устойчивого положения равновесия $x = 0$, является дискретным и эквидистантным:

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

Эквидистантность энергетического спектра означает независимость разности $E_{n+1} - E_n$ энергий соседних уровней от номера n.

Энергия основного состояния гармонического осциллятора при $n = 0$

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega \qquad (3)$$

есть энергия случайного хаотического движения частицы, которое называется **нулевыми колебаниями**. Это квантовое движение не прекращается даже при абсолютном нуле температуры.

Еще раз отметим, что кинетическая энергия частицы, находящейся в ограниченной области пространства, всегда отлична от нуля.

Эффективная температура определяется формулой

$$T_{эф} = \frac{E_0}{k} = \frac{\hbar\omega}{k} = 4\cdot 10^3 \text{ К}, \qquad (4)$$

где $k = 1{,}38\cdot 10^{-23}$ Дж/К - постоянная Больцмана. Таким образом, кинетическая энергия движения частицы в основном состоянии даже при абсолютном нуле температуры $T=0K$ согласно законам квантовой механики на порядок больше средней кинетической энергии теплового движения той же частицы при комнатной температуре $T = 300$ К.

Ответ: $T_{эф} = 4\cdot 10^3$.

Атомы вещества в конденсированном состоянии совершают гармонические колебания вблизи своих равновесных положений и поэтому обладают отличной от нуля энергией при T=0К. По порядку величины эта энергия нулевых колебаний

$$E_0 \approx \frac{h^2}{2Md^2},$$

где M – масса атома и d – диаметр области, приходящейся на один атом. Для атома He^4 M=6,64·10^{-27}кг, $d \approx 4{,}5$ Å и E_0=1,6·10^{-22}Дж, что соответствует эффективной температуре $T_{эф}$=10К. Поскольку взаимодействия атомов гелия на расстоянии порядка d относительно невелико, то даже при понижении температуры до 0,001К жидкий гелий не затвердевает, если давление ниже 30 атмосфер. Это связано с квантовым движением атомов гелия при низкой температуре. С повышением давления расстояние между атомами гелия уменьшается и приводит к более быстрому росту энергии их взаимодействия по сравнению с энергией нулевых колебаний, что в конечном итоге обуславливает переход гелия в твердое состояние.