Лекция 15. Квантовое туннелирование

В квантовой механике физические величины описываются не числами, как в классической механике, а **операторами** — специальными математическими правилами, действующими на волновые функции. Квантовые операторы — это символические обозначения преобразований, сопоставляющих одной волновой функции другую. Например, если $\Psi(x, y, z, t)$ — волновая функция частицы, то оператор $\hat{F}$ действует на неё следующим образом:

$$\chi(x, y, z, t) = \hat{F}\Psi(x, y, z, t).$$

Каждой классической величине $F(x, y, z, p_x, p_y, p_z)$ соответствует квантовый оператор $F(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}, \hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z)$. Например, координата и импульс в одномерном случае заменяются на:

$$\hat{x} = x, \quad \hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x},$$

где $\hbar$ — приведённая постоянная Планка.

Большинство операторов в квантовой механике — линейные. Это означает, что:

$$\hat{F}(a\Psi_1 + b\Psi_2) = a\hat{F}\Psi_1 + b\hat{F}\Psi_2,$$

для любых комплексных чисел a и b и функций Ψ_1, Ψ_2.

Особую роль играет **гамильтониан** $\mathcal{H}$ — оператор полной энергии системы. В классической механике энергия выражается через функцию Гамильтона $H(q, p)$, в квантовой механике она становится оператором $\mathcal{H}$, действующим на волновую функцию.

Если при действии оператора $\hat{F}$ на некоторую функцию $\psi(\xi)$ получается та же функция, умноженная на число λ, то ψ называется **собственной функцией** оператора, а λ — соответствующим **собственным значением**:

$$\hat{F}\psi(\xi) = \lambda\psi(\xi).$$

Собственные значения операторов физических величин соответствуют измеряемым значениям этих величин.

Одним из важнейших свойств квантовой механики является принцип суперпозиции: если Ψ_1 и Ψ_2 — допустимые состояния системы, то любая их линейная комбинация

$$\Psi = C_1\Psi_1 + C_2\Psi_2$$

тоже представляет возможное состояние, где $C_1, C_2 \in \mathbb{C}$. В общем случае:

$$\Psi = \sum_{i=1}^{n} C_i\Psi_i.$$

Фундаментальное уравнение квантовой механики — это **уравнение Шрёдингера**. В общем (временном) виде оно записывается так:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(x, t)}{\partial t} = \hat{\mathcal{H}}\Psi(x, t),$$

где гамильтониан $\hat{\mathcal{H}}$ для частицы массы m в потенциале $U(x)$ имеет вид:

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x).$$

Таким образом, уравнение Шрёдингера принимает форму:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + U(x)\Psi.$$

В случае, когда потенциал не зависит от времени, можно искать **стационарные** решения в виде $\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$. Тогда уравнение Шрёдингера переходит в стационарную форму:

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

или, что то же самое:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U(x))\psi = 0.$$

Примером задачи на стационарное уравнение Шрёдингера является движение частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме. Пусть частица заключена между двумя бесконечными стенками на расстоянии L, тогда $U(x) = 0$ при $0 < x < L$ и $U(x) = \infty$ вне этого интервала. Решение принимает вид:

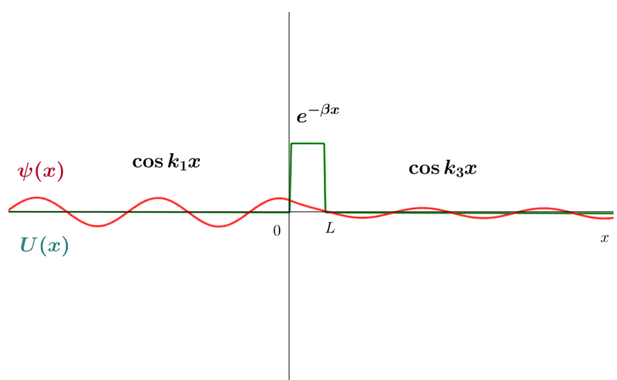
$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right), \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

с дискретными значениями энергии:

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2}.$$

Если потенциальный барьер конечной высоты, но выше энергии частицы, то классически она не может его преодолеть. Однако в квантовой механике волновая функция затухает, но не обнуляется в пределах барьера:

$$\psi(x) \sim e^{-\kappa x}, \quad \kappa = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}.$$



Существует ненулевая вероятность прохождения частицы через барьер — это и есть **туннельный эффект**.

Рассмотрим также важную модель — **квантовый гармонический осциллятор**, для которого потенциал имеет вид $U(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$. Стационарное уравнение Шрёдингера принимает форму:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\psi = E\psi.$$

Решения этого уравнения — функции, содержащие многочлены Эрмита и гауссовы экспоненты.

Энергетические уровни дискретны:

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

Это фундаментальный результат, иллюстрирующий нулевую (невыводимую) энергию даже в основном состоянии ($n = 0$), что согласуется с принципом неопределённости Гейзенберга.

Наконец, важно упомянуть **принцип Паули**, согласно которому никакие два фермиона (например, электрона) не могут находиться в одном и том же квантовом состоянии одновременно. Это объясняет электронную структуру атомов и существование периодической таблицы элементов.