

MECHANIKA KWANTOWA

Związek de Broglie'a

$$p = \frac{h}{l}$$

przyjęto wyrażać przez liczbę falową $k = 2p/l$

$$p = \frac{h}{2p} \frac{2p}{l} = \frac{h}{2p} k.$$

Wprowadzono specjalne oznaczenie

$$\mathbf{h} = \frac{h}{2p}$$

$$p = \mathbf{h}k \tag{11.1}$$

Rozważmy cząstkę poruszającą się wzdłuż osi x , której długość fali jest równa λ_0 . Liczba falowa cząstki $k_0 = 2p/l_0$.

Nie można przyjąć funkcję falową w postaci

$$Y = A \cos(k_0 x - \omega t)$$

ale w postaci

$$Y = A e^{i(k_0 x - \omega t)}.$$

Wówczas

$$|Y|^2 = Y^*Y = \left(Ae^{-i(k_0x - wt)}\right)\left(Ae^{i(k_0x - wt)}\right) = A^2$$

Zastosowanie zespolonej funkcji falowej rozwiązuje wskazane powyżej trudność i daje równomierny rozkład prawdopodobieństwa na osi x .

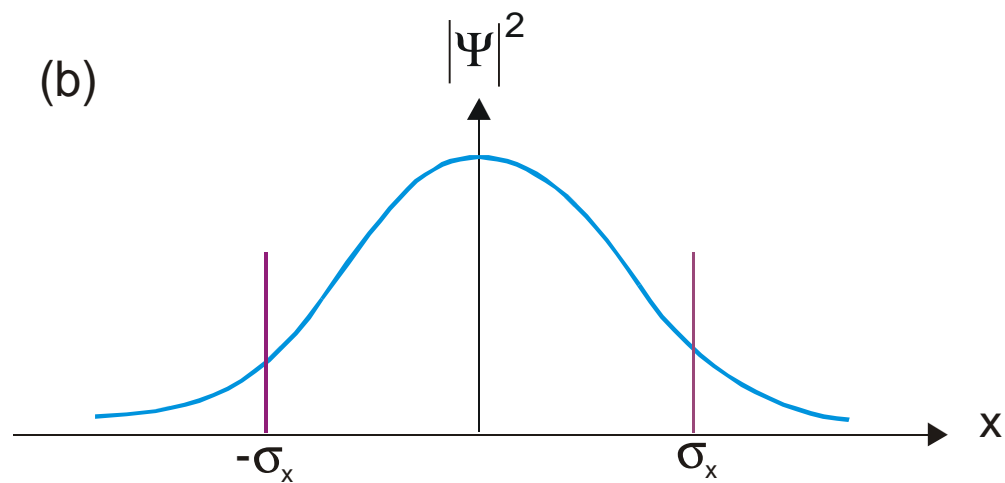
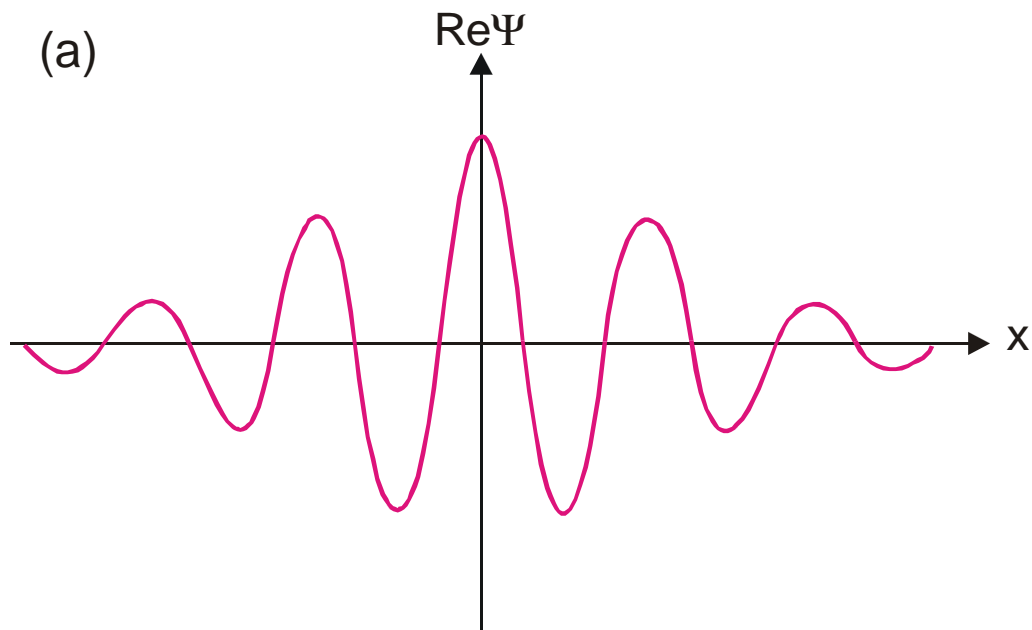
Ze wzoru Eulera wynika, że urojoną i rzeczywistą część funkcji Y stanowią fale monochromatyczne

$$\operatorname{Re}Y = A \cos(k_0x - wt)$$

$$\operatorname{Im}Y = A \sin(k_0x - wt)$$

Udowodniliśmy, że jeżeli pęd cząstki posiada określoną wartość, to cząstkę można znaleźć z jednakowym prawdopodobieństwem w dowolnym punkcie przestrzeni. Inaczej mówiąc, **jeżeli pęd cząstki jest dokładnie znany, to nic nie wiemy o jej miejscu położenia.**

W większości sytuacji fizycznych wiadomo, że cząstka znajduje się w określonym obszarze przestrzeni.



Rys. 11.1. Paczka falowa w postaci rozkładu Gaussa: (a) zależność rzeczywistej części funkcji falowej od x ; (b) zależność kwadratu modułu funkcji falowej (lub gęstości prawdopodobieństwa) od x .

Rozważmy na przykład, następującą funkcję falową w chwili czasu $t = 0$

$$Y(x,0) = A \exp\left(-\frac{x^2}{4s_x^2}\right) \exp(ik_0 x) \quad (11.2)$$

Rozkład prawdopodobieństwa

$$|Y|^2 = A^2 \exp\left(-\frac{x^2}{2s_x^2}\right)$$

Funkcja

$$\exp\left(-\frac{x^2}{2s_x^2}\right) \text{ rozkład Gaussa}$$

gdzie s_x jest odchyleniem średniokwadratowym, które będziemy nazywać nieokreślonością wielkości x i oznaczać przez D_x .

Taka zlokalizowana funkcja nazywana jest paczką falową.

Paczkę falową można przedstawić w postaci fal monochromatycznych. Rozpatrzmy paczkę falową w chwili czasu $t = 0$ i dobierzemy stosowną superpozycję fal monochromatycznych typu $\exp(ikx)$

$$Y = \exp\left(-\frac{x^2}{4s_x^2}\right) \exp(ik_0 x) = \sum B_n \exp(ik_0 x)$$

Przejdziemy od sumowania do całkowania

$$Y = \exp\left(-\frac{x^2}{4s_x^2}\right) \exp(ik_0 x) = \int B(k) \exp(ik_0 x) dx \quad (11.3)$$

Posłużymy się następującą tożsamością matematyczną:

$$\exp\left(-\frac{x^2}{4s_x^2}\right) \exp(ik_0 x) = \frac{s_x}{\sqrt{p}} \int \exp\left[-s_x^2(k - k_0)^2\right] \exp(ikx) dx$$

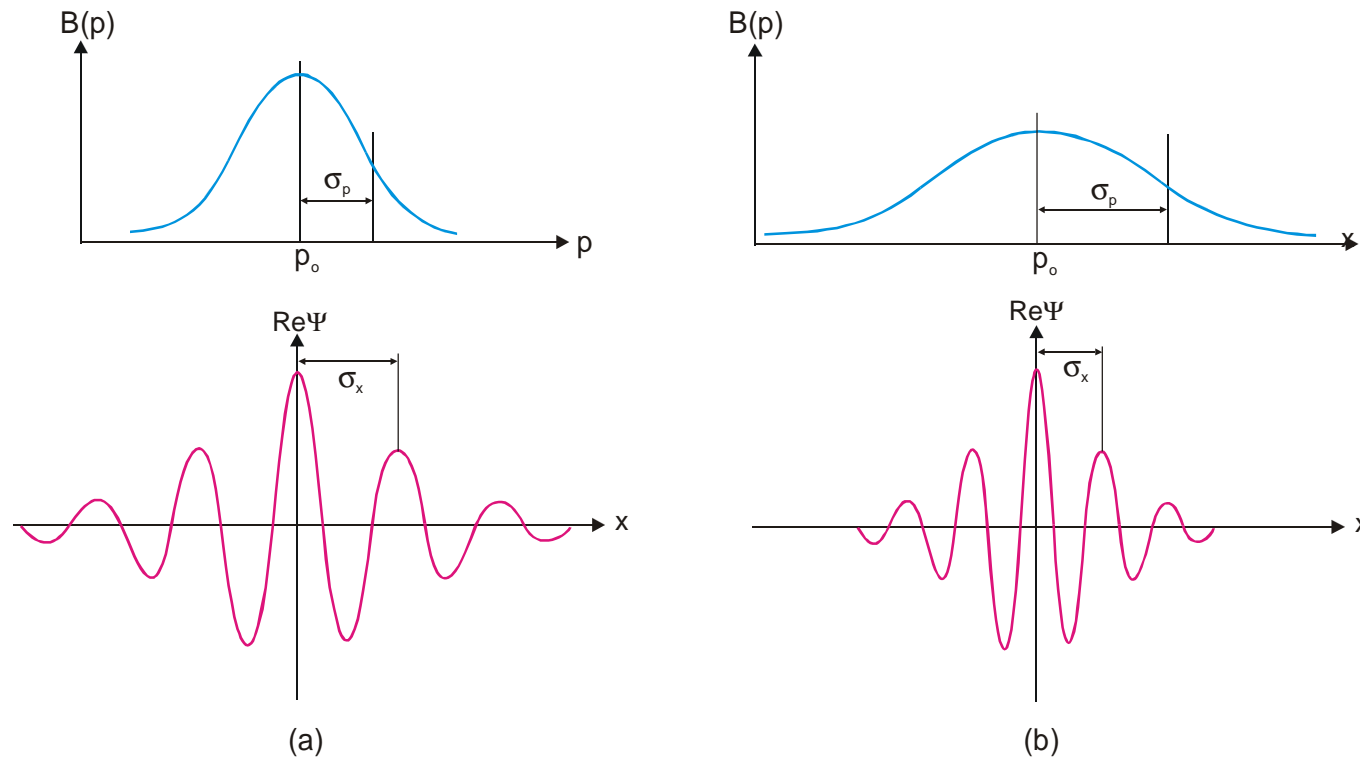
Porównując ostatnie dwa, mamy

$$B(k) = \frac{s_x}{\sqrt{p}} \exp\left[-s_x^2(k - k_0)^2\right]$$

Zamieniając k na p / \hbar mamy

$$B(p) = \frac{s_x}{\sqrt{p}} \exp\left[-\frac{(p - p_0)^2}{(\hbar/s_x)^2}\right]$$

Zasada nieoznaczoności



Rys. 11.2. Funkcja rozkładu $B(p)$ względem pędu (u góry) i odpowiadająca jej paczka falowa (poniżej). Szerokość paczki falowej na rys. (a) przewyższa dwa razy szerokość na rys. (b). Zauważamy, że w obydwu przypadkach iloczyn $s_x s_p$ jest jednakowy.

Czym węższa jest przestrzennie paczka falowa tym szerszy rozkład po pędzie.

Prawdopodobieństwo różnych wartości pędu określone jest funkcją:

$$|B(p)|^2 = \frac{s_x^2}{p} \exp\left[-\frac{(p-p_0)^2}{2(\hbar/2s_x)^2}\right] \quad (11.5)$$

Widzimy, że wyrażenie $|B(p)|^2$ jest także rozkładem Gaussa dla p i można je napisać w postaci:

$$|B(p)|^2 = \frac{s_x^2}{p} \exp\left[-\frac{(p - p_0)^2}{2s_p^2}\right] \quad (11.6)$$

gdzie s_p jest odchyleniem średniokwadratowym czyli "nieoznaczonością" wielkości p .

Porównując wyrażenia (11.5) i (11.6) otrzymujemy

$$s_p = \frac{\mathbf{h}}{2s_x} \quad s_p s_x = \frac{\mathbf{h}}{2} \quad (11.7)$$

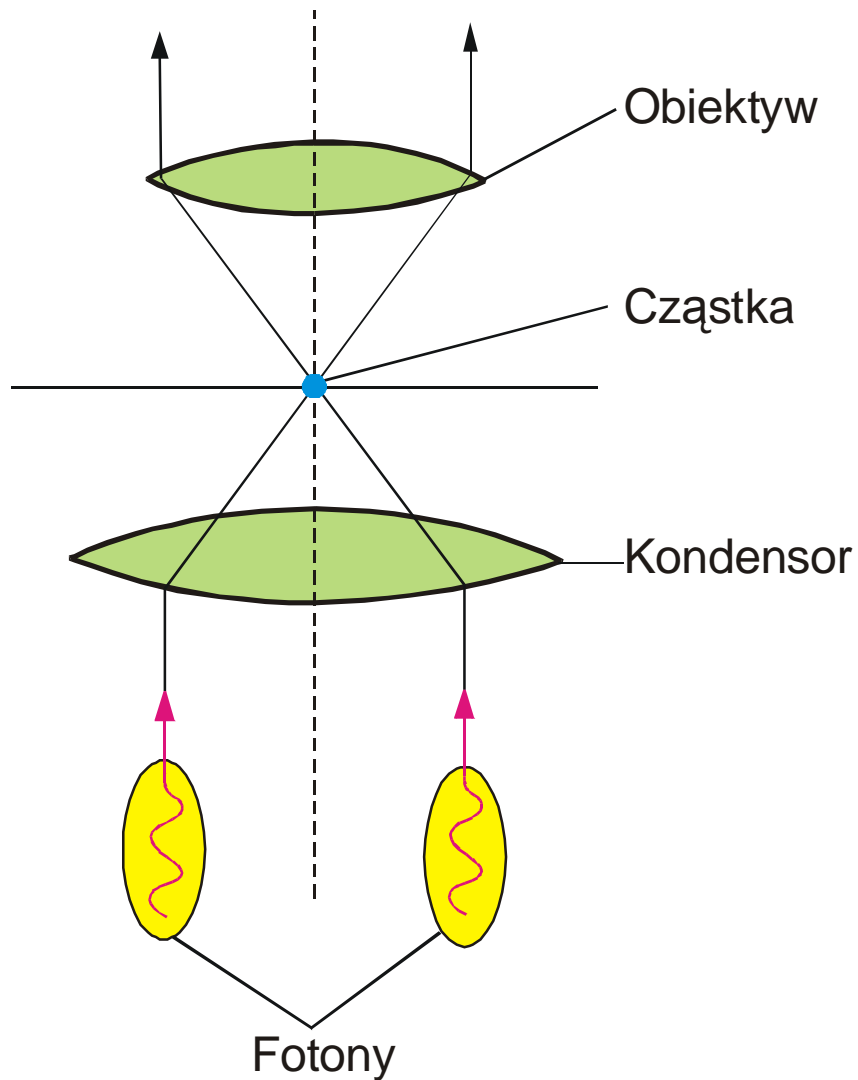
Wobec tego, w przypadku funkcji falowej w postaci rozkładu Gaussa iloczyn szerokości paczki falowej przez szerokość funkcji rozkładu po pędzie jest równy $\mathbf{h}/2$.

W ogólnym przypadku mamy

$$DxDp \geq \frac{\mathbf{h}}{2} \quad (11.8)$$

Zasada nieoznaczoności potwierdza, że jeżeli cząstka zlokalizowana jest w przestrzeni z odchyleniem średniokwadratowym Dx , to jej pęd nie ma określonej wartości, lecz charakteryzuje się rozkładem $|B(p)|^2$ o "szerokości" Dp . Fizycznie to oznacza, że niemożliwe jest jednocześnie dokładne określenie wartości współrzędnej i pędu cząstki.

Jeżeli wiadomo, że cząstka jest w spoczynku, to



Rys. 11.3. Oddziaływanie fotonów z cząstką w mikroskopie.

nieokreśloność jej pędu $Dp = 0$.

W najlepszym przypadku, mikroskop pozwala określić położenie cząstki z dokładnością do długości fali stosowanego źródła. Wobec tego $Dx \gg \lambda$. Ponieważ $Dp = 0$ to iloczyn $DxDp$ także powinien być równy zero i zasada nieoznaczoności jest naruszona! Czy to jest prawdziwe rozumowanie?

Z pozycji mechaniki kwantowej, światło składa się z fotonów o pędzie $p = h/\lambda$. Ażeby zaobserwować cząstkę, to na niej powinien ulec rozproszeniu lub pochłonięciu (w skrajnym przypadku) jeden z fotonów wiązki światła zebranej soczewką skupiającą (rys. 11.3). Wobec tego cząstce będzie przekazany pęd $p = h/\lambda$. Stąd w chwili obserwacji położenia cząstki z dokładnością $Dx \gg \lambda$, nieokreśloność jej pędu jest $Dp \geq h/\lambda$. Mnożąc te nieoznaczoności otrzymujemy

$$DxDp \geq \lambda \frac{h}{\lambda} = h$$

co jest zgodne z (11.8).

Paczka falowa propaguje się nie z prędkością grupową

$$v_g = \frac{dw}{dk}$$

Zgodnie ze związkami de Broglie'a

$$\mathbf{h}w = E \quad \text{i} \quad \mathbf{h}k = p$$

Zamieńmy w wyrażeniu $E = p^2/2m$ wielkość E na $\mathbf{h}w$, a p na $\mathbf{h}k$; wówczas

$$\mathbf{h}w = \frac{(\mathbf{h}k)^2}{2m}$$

Różniczkując to wyrażenie po k

$$\mathbf{h} \frac{dw}{dk} = \frac{\mathbf{h}^2 k}{m}$$

$$\frac{dw}{dk} = \frac{\mathbf{h}k}{m} = \frac{p}{m} = v$$

czyli

$$v_g = v$$

Paczka falowa przemieszcza się z prędkością równą prędkości cząstki.

Rozpatrzmy teraz dwie cząstki z których jedna posiada prędkość v_g , a druga – prędkość $v_g + Dv_g$. W chwili czasu $t = 0$ ich współrzędne są zgodne, a po upływie pewnego czasu t cząstki rozejdą się na odległość

$$Dx = (Dv_g)t \quad (11.9)$$

Udowodnimy, że pojedynczej paczce falowej właściwy jest rozrzut wartości prędkości grupowej Dv_g , który zgodnie z (11.9) powinien prowadzić do zwiększenia szerokości Dx .

Mamy

$$Dv_g = \frac{dv_g}{dp} Dp$$

Wprowadzając w miejsce v_g napisać v

$$Dv_g = \frac{dv}{dp} Dp \approx \frac{1}{m} Dp \quad (11.10)$$

Początkowa wartość Dp jest ograniczona, zgodnie z zasadą nieoznaczoności, wielkością \mathbf{h}/Dx_0 , gdzie Dx_0 oznacza nieokreśloność położenia początkowego, czyli szerokość wyjściowej paczki falowej. Podstawiając tę wielkość do (11.10) otrzymujemy

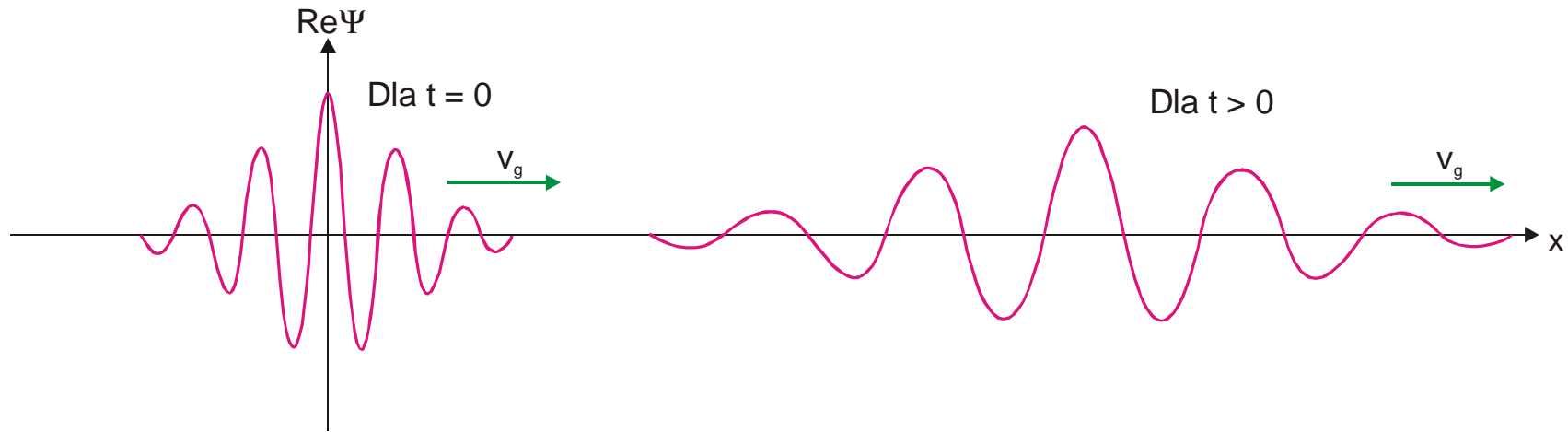
$$Dv_g \approx \frac{1}{m} \left(\frac{\mathbf{h}}{Dx_0} \right)$$

Podstawienie ostatniego wyrażenia do (11.9) daje

$$Dx \approx \frac{\mathbf{h}}{mDx_0} t$$

Szerokość paczki falowej rośnie proporcjonalnie do t .

"Rozpływania się" paczki falowej można uniknąć umieszczając cząstkę w studni potencjału.



Rys. 11.4. Paczka falowa w dwóch kolejnych chwilach czasu. Paczka porusza się w prawo z prędkością grupową zgodnie z prędkością cząstki.

Rozpatrzmy swobodny elektron zlokalizowany w chwili początkowej w obszarze $Dx_0 = 10^{-10}$ m (typowy rozmiar atomu).

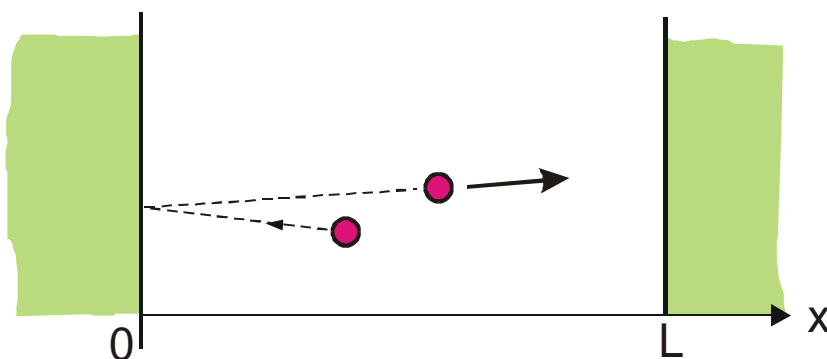
Po upływie sekundy będziemy mieć

$$Dx = \frac{\hbar t}{mDx_0} \approx 1100 \text{ km}$$

Chociaż teoria kwantowa pozwala ściśle określić zachowanie funkcji falowej w przyszłości, jeżeli jest ona znana w chwili początkowej, nie ma jednak istotnego znaczenia ponieważ funkcja falowa bardzo szybko rozpływa się po całej przestrzeni.

Mechanika kwantowa a determinizm i swobodna wola. Jednakże to nie oznacza, że mamy prawo powoływać się na mechanikę kwantową jako na dowód istnienia swobodnej woli.

Cząstka w studni potencjału



Rys. 11.5. Cząstka odbija się od lewej ścianki studni o długości L .

Na prawo od ścianki w punkcie $x = 0$ (rys. 11.5) zachodzi nałożenie dwóch fal rozchodzących się w przeciwnych kierunkach:

$$Y(x, t) = Be^{ikx - i\omega t} - Be^{-ikx - i\omega t} = B(e^{ikx} - e^{-ikx})e^{-i\omega t}$$

Wybraliśmy znak minus ze względu na to, że Y powinno przyjmować zerową wartość przy $x = 0$. Stosując znany wzór

$$\sin(kx) = \frac{e^{ikx} - e^{-ikx}}{2i}$$

napiżemy $Y(x, t)$ w postaci

$$Y(x, t) = 2iBe^{-i\omega t} \sin(kx) = Ae^{-i\omega t} \sin(kx) \quad (11.11)$$

gdzie $A = 2Bi$. Funkcja $Y(x)$ powinna przyjmować wartość zerową przy $x = L$ i $x = 0$.

Podstawiając do (11.11) w miejsce x wielkość L , otrzymamy

$$\sin(kL) = 0$$

Równość ta jest spełniona kiedy

$$kL = np,$$

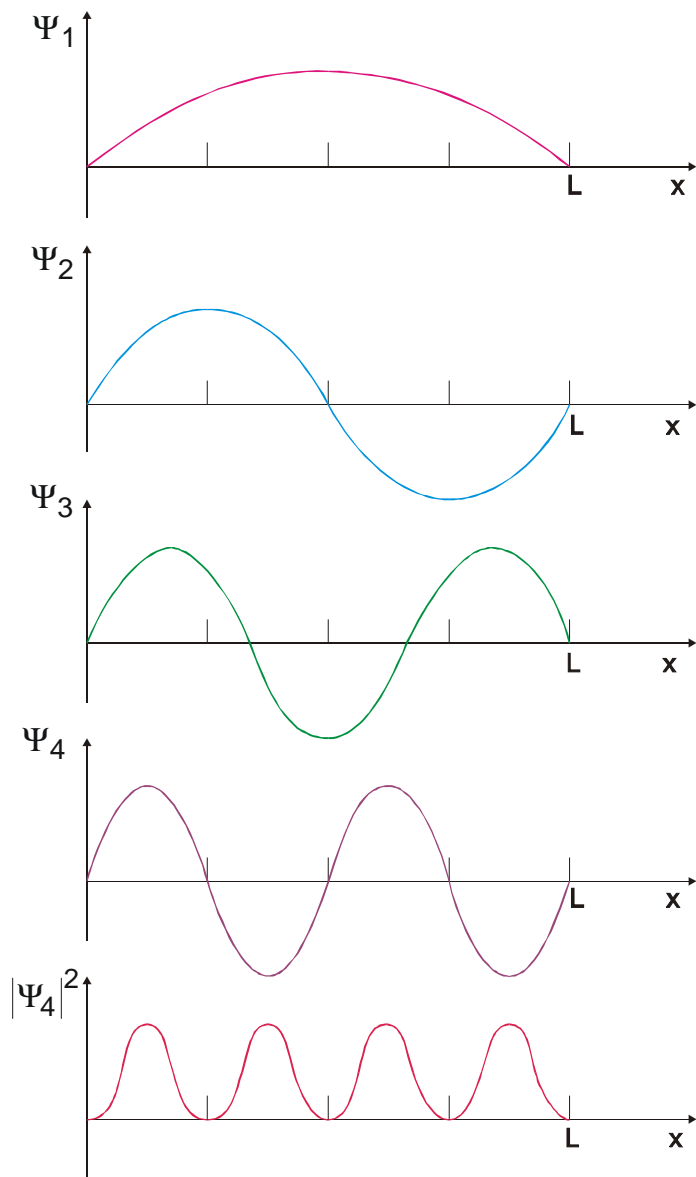
gdzie n jest liczbą całkowitą.

Dozwolone są tylko takie wartości liczby falowej k_n , które spełniają równanie

$$k_n = \frac{np}{L} \tag{11.12}$$

Tym samym zażądaliśmy, aby w studni ułożyła się całkowita liczba półfal, co jest zgodne z warunkiem powstania fali stojącej na strunie:

$$L = n \frac{l}{2}$$



Rys. 11.6. Pierwsze cztery fale stojące odpowiadające cząstce w studni; na najniższym rysunku pokazano gęstość prawdopodobieństwa cząstki w stanie z $n = 4$.

Na rys. 11.6 przedstawiono funkcje falowe

$$Y_n(x) = A \sin\left(\frac{np}{L}\right)x$$

dla $n = 1, 2, 3, 4$.

Odpowiednie wartości pędu zapiszemy w postaci

$$p_n = \mathbf{h}k_n$$

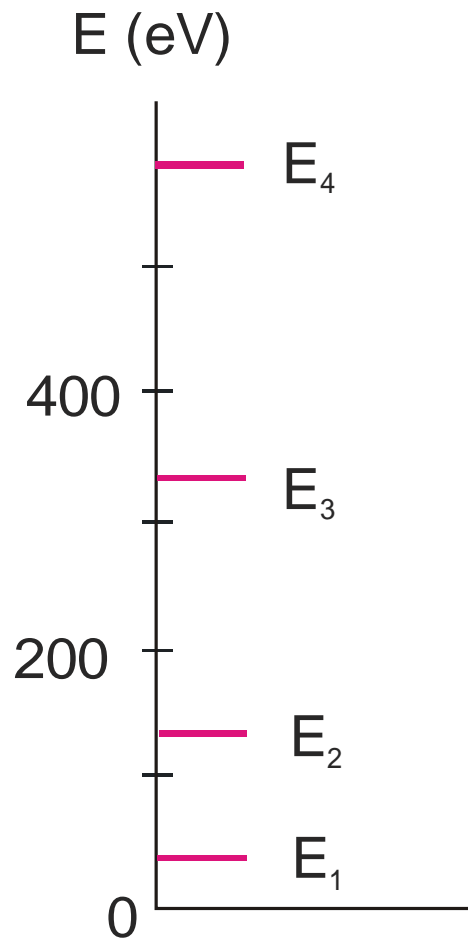
czyli z uwzględnieniem (11.12)

$$p_n = n \frac{p\mathbf{h}}{L} \quad (11.13)$$

Tym pędom odpowiadają wartości energii kinetycznej

$$E_n = \frac{p_n^2}{2m} = n^2 \frac{p^2 \mathbf{h}^2}{2mL^2} \quad (11.14)$$

Najniższa możliwa energia $p^2 \mathbf{h}^2 / 2mL^2$ odpowiada $n = 1$, a odpowiadająca jej funkcja falowa przedstawia połowę sinusoidy. Energię odpowiadającą $n = 1$ nazywamy energią stanu podstawowego. W mechanice kwantowej cząstka w studni nie może posiadać energii mniejszej niż $p^2 \mathbf{h}^2 / 2mL^2$, wskutek tego, że Y w studni nie może być funkcją zerową.



Rozważmy elektron zamknięty w studni o rozmiarach typowych dla atomu – 10^{-10} m. W tym przypadku $E_n = (37.2n^2)$ eV.

Energia (lub długości fal) emitowanych fotonów przez elektrony także przyjmuje dyskretny zbiór wartości. Takie "widmo" charakteryzujące się dyskretnymi wartościami energii emitowanych fotonów nazywamy liniowym

Rys. 11.7. Cztery najniższe poziomy energetyczne elektronu znajdującego się w studni o szerokości 10^{-10} m.

Równanie Schrödingera

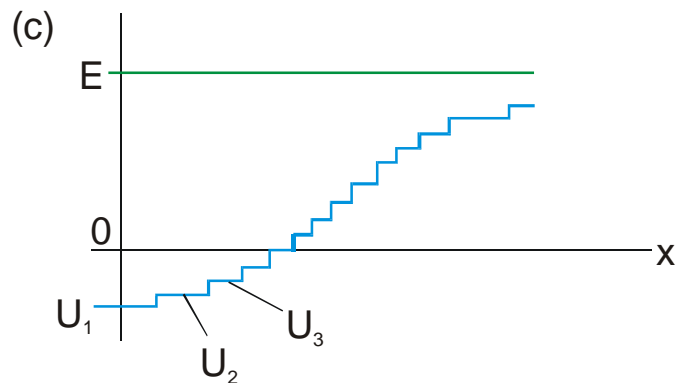
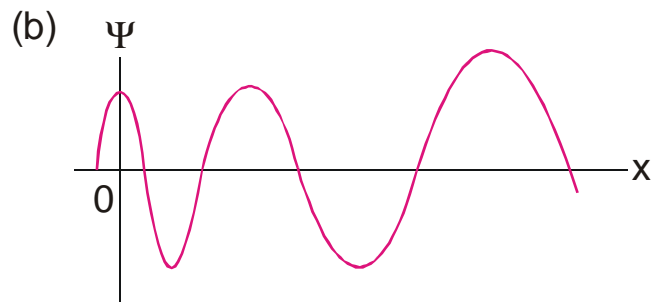
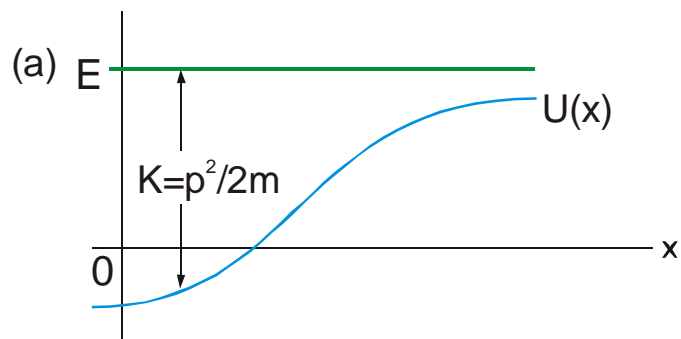
Dotychczas mieliśmy do czynienia z cząstkami swobodnymi, które charakteryzowały się określonym pędem, a stąd i określoną energią. W bardziej ogólnym przypadku na cząstkę mogą działać siły zewnętrzne scharakteryzowane energią potencjalną oddziaływania $U(x)$. Ponieważ całkowita energia

$$E = \frac{p^2}{2m} + U(x) \quad (11.15)$$

pozostaje stała (stany stacjonarne), wzrostowi energii potencjalnej U ze wzrostem x towarzyszyć będzie zmniejszenie pędu p z odpowiednim zwiększeniem długości fali. Wobec tego funkcji falowej powinna odpowiadać zmieniająca się długość fali.

Na rys. 11.8b pokazana jest funkcja falowa, której długość fali zwiększa się ze wzrostem x .

Dokładną postać funkcji falowej $Y(x)$ ze zmieniającą się długością fali można znaleźć rozwiązując równanie różniczkowe zwane równaniem Schrödingera. Znajdziemy to równanie dla przypadku kiedy $U(x)$ można aproksymować funkcją schodkową przedstawioną na rys. 11.8c.



Rys. 11.8. (a) Ze wzrostem x wzrasta energia potencjalna, a k zmniejsza się; (b) odpowiadająca funkcja falowa $Y(x)$, której długość fali wzrasta z x ; (c) aproksymacja funkcją schodkową funkcji $U(x)$ przedstawionej na rys. (a).

W ogólnym przypadku funkcja falowa cząstki w studni ma postać

$$Y = A \sin(kx + j)$$

gdzie pęd p można otrzymać ze związku $E = p^2/2m + U_1$

$$p = \sqrt{2m(E - U_1)}$$

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - U_1)}$$

Wobec tego druga pochodna Y ma postać

$$\frac{d^2 Y}{dx^2} = -k^2 A \sin(kx + j) = -k^2 Y$$

$$\frac{d^2 Y}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} [E - U_1] Y$$

Równanie to jest słuszne dla obszaru U_1 .

Ponieważ to równanie jest również słuszne dla U_2, U_3, \dots, U_j , a dowolną funkcję $U(x)$ można przedstawić w postaci doboru małych "schodków", to U_1 można zamienić na $U(x)$.

$$\frac{d^2 Y}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} [E - U(x)] Y \quad (11.16)$$

Jest to stacjonarne, jednowymiarowe równanie Schrödingera słuszne w układach nierelatywistycznych pod warunkiem, że rozkład prawdopodobieństwa nie zmienia się w czasie; inaczej mówiąc, jest ono słuszne w przypadkach kiedy funkcje mają postać fal stojących.

Niestacjonarne równanie Schrödingera jest zależne od czasu; stosowane jest przy rozwiązywaniu zadań, w których paczka falowa zmienia się w czasie.

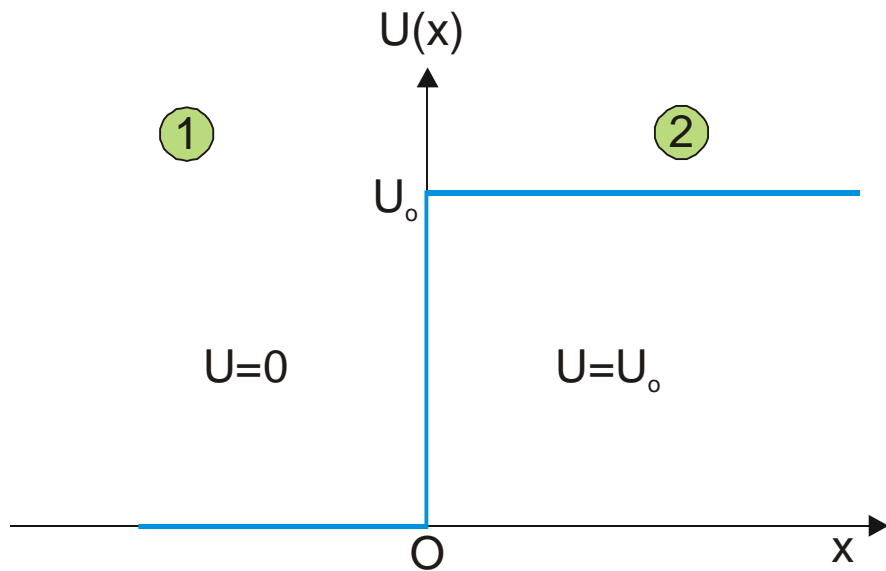
Ponieważ kwadrat modułu funkcji falowej określa gęstość prawdopodobieństwa znalezienia cząstki, więc tylko te rozwiązania równania Schrödingera mają sens fizyczny i są funkcjami falowymi, które tak jak to prawdopodobieństwo są: **jednoznaczne, ciągłe wraz z pierwszymi pochodnymi oraz nie rosną nieograniczenie w nieskończoności.**

Jeżeli cząstka zamknięta jest w studni potencjalnej, to prawdopodobieństwo jej znalezienia na zewnątrz jest zerowe; tak więc w tym przypadku warunek graniczny znalezienia cząstki przy dużych wartościach $|x|$ jest zerowy. Temu warunkowi granicznemu odpowiadają jedynie określone wartości E (będziemy je oznaczać przez E_n) i odpowiadające im funkcje falowe Y_n .

Wartości energii E_n nazywamy wartościami własnymi, a odpowiadające im funkcje falowe Y_n – funkcjami własnymi.

Bariera potencjału. Efekt tunelowy.

Przedyskutujmy teraz jednowymiarowy ruch cząstek w obszarze, w którym energia potencjalna zmienia się skokowo. Na początek rozpatrzmy skok potencjału przedstawiony na rys. 11.9



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

W praktyce nigdy nie ma dokładnie prostokątnego skoku potencjału. Model ten jest dobrym przybliżeniem wielu sytuacji fizycznych, np. skoku potencjału istniejącego na powierzchni metalu (patrz rys. 10.5).

Rys. 11.9. Skok potencjału.

Niech cząstka porusza się z lewa na prawo wzdłuż osi x i założmy, że $E > U_0$. Według praw mechaniki klasycznej, w punkcie $x = 0$ na cząstkę będzie działać siła opóźniająca $F = -dU/dx$, i cząstka będzie poruszała się ze zmniejszoną prędkością. Zobaczymy, że w przypadku kwantowym jest inaczej.

Dla $x < 0$ równanie Schrödingera i jego rozwiązanie mają postać

$$\frac{d^2 Y_1}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E Y_1 = 0$$
$$Y_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x} \quad (11.17)$$

gdzie

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E}$$

Natomiast dla $x > 0$ mamy

$$\frac{d^2 Y_2}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0) Y_2 = 0$$
$$Y_2(x) = A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x} \quad (11.18)$$

gdzie

$$k_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0)}$$

W funkcji Y_1 [wzór (11.17)] człon $A_1 \exp(ik_1 x)$ przedstawia falę propagującą się w kierunku dodatnich wartości osi x (falę padającą), a człon $B_1 \exp(-ik_1 x)$ – falę propagującą się w kierunku ujemnych wartości osi x (falę odbitą).

Ponieważ dla $x > 0$ nie ma skoku potencjału, nie ma więc fizycznych powodów pojawienia się fali odbitej i dlatego $B_2 = 0$.

W punkcie $x = 0$, mamy

$$Y_1(0) = Y_2(0) \quad ; \quad A_1 + B_1 = A_2$$

$$\left(\frac{dY_1}{dx} \right)_{x=0} = \left(\frac{dY_2}{dx} \right)_{x=0} \quad ; \quad k_1(A_1 - B_1) = k_2 A_2$$

Wyrażając B_1 i A_2 za pomocą A_1 i podstawiając do wzorów (11.17) i (11.18) otrzymujemy

$$Y_1 = A_1 e^{ik_1 x} + A_1 \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} e^{-ik_1 x}$$

$$Y_2 = A_1 \frac{2k_1}{k_1 + k_2} e^{ik_2 x}$$

Współczynnik transmisji, T , definiujemy jako stosunek gęstości strumienia cząstek przechodzących do gęstości strumienia cząstek padających.

Klasycznie gęstość strumienia cząstek jest to liczba cząstek przechodzących w jednostce czasu przez jednostkową powierzchnię prostopadłą do kierunku wiązki i jest równa iloczynowi gęstości cząstek przez ich prędkość. Ponieważ w ujęciu kwantowym odpowiednikiem gęstości cząstek jest gęstość prawdopodobieństwa $|Y|^2$, dlatego współczynnik transmisji T

$$T = \frac{v_2 |A_2|^2}{v_1 |A_1|^2} \quad (11.19)$$

gdzie v_1 i v_2 są prędkościami cząstki w obszarze 1 i 2.

Ponieważ

$$v_1 = \frac{p_1}{m} = \frac{\hbar k_1}{m} \quad ; \quad v_2 = \frac{p_2}{m} = \frac{\hbar k_2}{m}$$

więc ostatecznie

$$T = \frac{k_2}{k_1} \left(\frac{2k_1}{k_1 + k_2} \right)^2 = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2} = \frac{4 \sqrt{\frac{E - U_o}{E}}}{\left(1 + \sqrt{\frac{E - U_o}{E}} \right)^2} \quad (11.20)$$

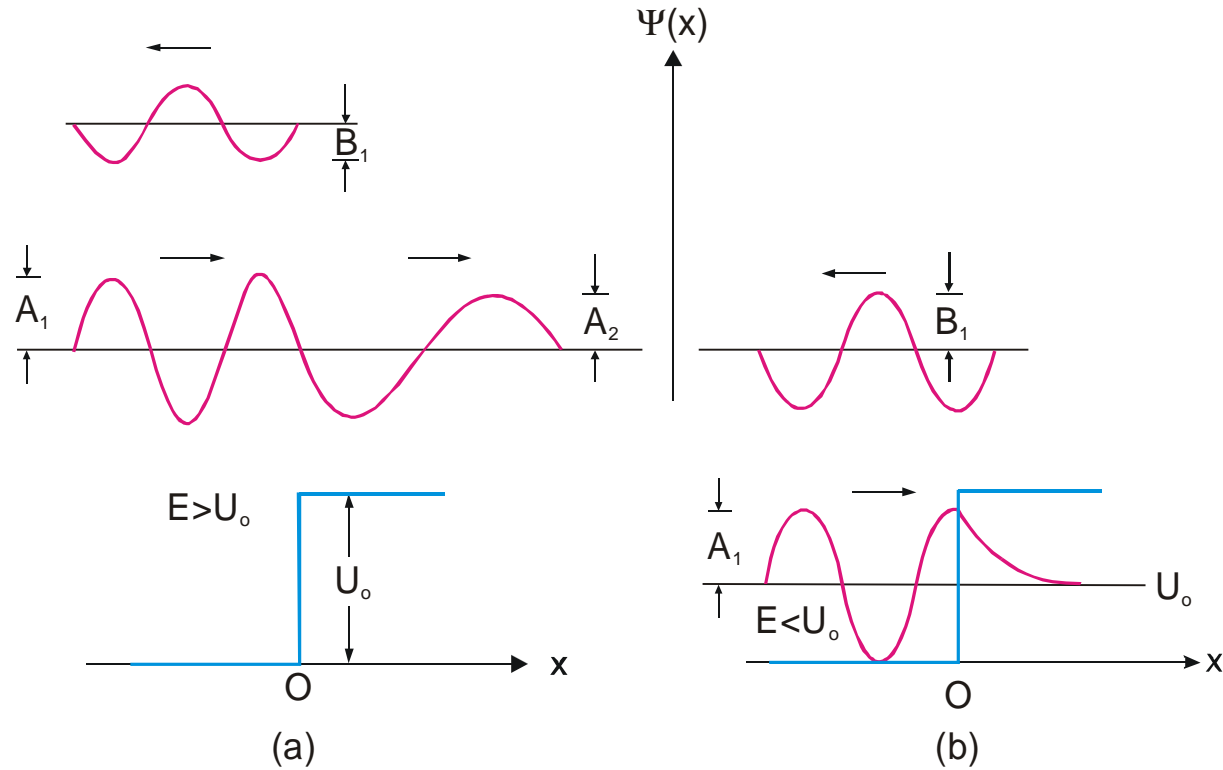
Podobnie obliczamy współczynnik odbicia R

$$R = \frac{v_1 B_1^2}{v_2 A_1^2} = \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2} = \frac{\left(1 - \sqrt{\frac{E - U_o}{E}} \right)^2}{\left(1 + \sqrt{\frac{E - U_o}{E}} \right)^2}$$

Oczywiście musi zachodzić związek $R + T = 1$, co jak łatwo sprawdzić jest w naszym przypadku spełnione.

Przyjmując falowy charakter cząstek, wynik ten nie powinien być zaskoczeniem. Gdy fale świetlne padają na granicę między dwoma przezroczystymi ośrodkami, to część światła odbija się, a reszta przechodzi do drugiego ośrodka.

Odbicie cząstek powoduje, że np. w zjawisku fotoemisji elektrony mogą zostać zawrócone do metalu, nawet jeśli energia jest większa od pracy wyjścia. Może to prowadzić do zmniejszenia czułości fotokomórek, zwłaszcza dla światła o częstotliwości niewiele większej od częstotliwości progowej.



Rys. 11.10. Funkcje falowe dla cząstek poruszających się w obszarze w którym występuje skok potencjału: (a) $E > U_0$, (b) $E < U_0$.

Rozpatrzmy teraz przypadek, gdy $E < U_0$.

W obszarze pierwszym ($x < 0$) funkcja falowa jest taka sama jak poprzednio. Natomiast w obszarze drugim ($x > 0$) równanie Schrödingera i funkcja falowa mają postać:

$$\frac{d^2 Y_2}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E) Y_2 = 0$$

$$Y_2(x) = A_3 e^{cx} + B_3 e^{-cx} \quad (11.21)$$

gdzie

$$c = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E)}$$

Ponieważ Y_2 nie może wzrastać nieograniczenie, należy przyjąć, że $A_3 = 0$.

Korzystając ponownie z warunków ciągłości funkcji falowej i jej pochodnych w punkcie $x = 0$, otrzymujemy

$$B_1 = -\frac{k_1 - ic}{k_1 + ic} A_1$$

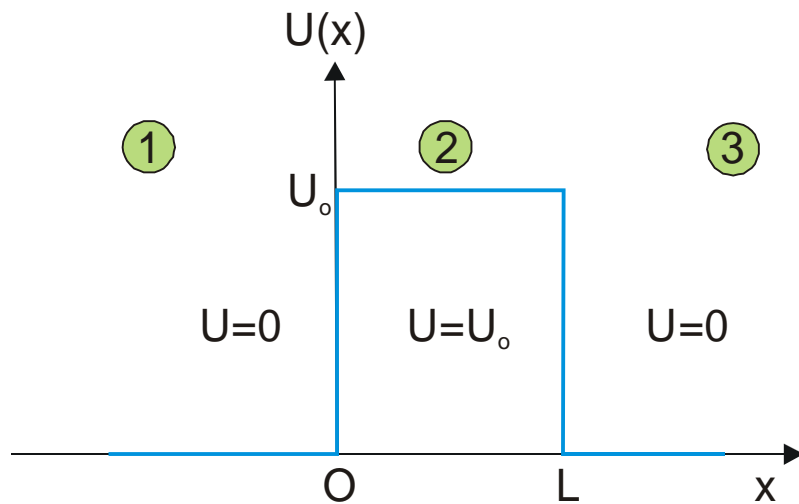
$$B_3 = \frac{2k_1}{k_1 + ic} A_1$$

Współczynnik odbicia

$$R = \frac{B_1 B_1^*}{A_1 A_1^*} = 1$$

Zgodnie ze wzorem (11.21) fala wchodząca do obszaru drugiego ($x > 0$) jest wykładniczo tłumiona i gęstość prawdopodobieństwa jest proporcjonalna do $\exp(-2c x)$. Na głębokości $x_0 = 1/2c$ gęstość prawdopodobieństwa maleje e razy; jest to tzw. efektywna głębokość przenikania cząstek przez barierę. Według mechaniki klasycznej cząstka o energii mniejszej od wysokości bariery nie może znaleźć się w obszarze tej bariery.

Rozpatrzmy teraz przypadek, kiedy cząstki padają na barierę o skończonej grubości (rys. 11.11).



Rys. 11.11. Bariera potencjału o skończonej szerokości.

Energia potencjalna zmienia się zgodnie z zależnością

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

Przeprowadzone powyżej rozważania pozwalają przypuszczać, że jeżeli $E < U_0$, to nastąpi przenikanie cząstek przez barierę, natomiast dla $E > U_0$ nastąpi odbicie. **Przenikanie cząstek przez barierę o skończonej grubości, gdy $E < U_0$, nosi nazwę efektu tunelowego.**

Równanie Schrödingera w obszarze 1 i 3 ma postać

$$\frac{d^2Y}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} EY = 0$$

natomiast w obszarze drugim

$$\frac{d^2Y}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E)Y = 0$$

Rozwiązaniami w poszczególnych obszarach są funkcje

$$Y_1 = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} \quad \text{w obszarze 1}$$

$$Y_2 = A_2 e^{cx} + B_2 e^{-cx} \quad \text{w obszarze 2}$$

$$Y_3 = A_3 e^{ikx} \quad \text{w obszarze 3}$$

gdzie

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E} \quad ; \quad c = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E)}$$

Korzystając z warunku ciągłości Y i dY/dx otrzymujemy dla $x = 0$

$$A_1 + B_1 = A_2 + B_2$$

$$ik(A_1 - B_1) = c(A_2 - B_2)$$

natomiast dla $x = l$

$$A_2 e^{cl} + B_2 e^{-cl} = A_3 e^{ikl}$$

$$c(A_3 e^{cl} - B_2 e^{-cl}) = ikA_3 e^{ikl}$$

Rozwiązując powyższy układ równań możemy wyznaczyć A_3 przez A_1 . Elementarne obliczenia prowadzą do wzoru

$$\frac{A_3}{A_1} = \frac{4icke^{ikl}}{(k+ic)^2 e^{cl} - (k-ic)^2 e^{-cl}} \quad (11.22)$$

Możemy teraz wyliczyć współczynnik transmisji

$$T = \frac{v_3}{v_1} \frac{A_3 A_3^*}{A_1 A_1^*} = \frac{A_3 A_3^*}{A_1 A_1^*}$$

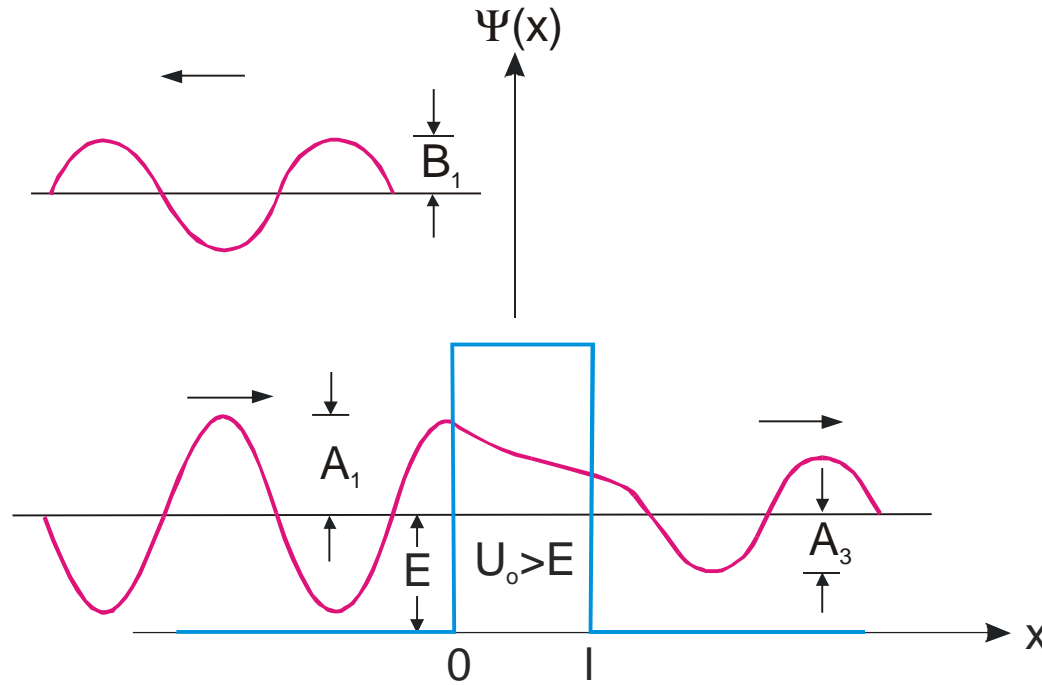
ponieważ prędkości w obszarze 1 i 3 są jednakowe. Uwzględniając wzór (11.22) otrzymujemy

$$T = \frac{16k^2 c^2}{(k^2 + c^2)^2 (e^{2cl} + e^{-2cl} - 2) + 16k^2 c^2} \quad (11.23)$$

Bardzo często spełniony jest warunek $cl \gg 1$. Wówczas z dobrym przybliżeniem

$$T = \frac{16k^2 c^2}{(k^2 + c^2)^2} e^{-2cl} = 16 \frac{E}{U_0} \left(1 - \frac{E}{U_0}\right) \exp\left[-\frac{2l}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}\right]$$

Z tego wzoru wynika, że prawdopodobieństwo przenikania bardzo szybko maleje wraz ze wzrostem szerokości bariery.



Rys. 11.12. Funkcja falowa dla cząstek o energii $E < U_0$ padających z lewej strony na barierę potencjału o skończonej szerokości.

Dla wiązki elektronów o energii $E = 8$ eV padającej na barierę o wysokości $U_0 = 10$ eV i szerokości $l = 2 \times 10^{-10}$ m otrzymamy $T = 0.12$ i $R = 0.88$. Przy szerokości bariery $l = 5 \times 10^{-10}$ m współczynnik transmisji wynosi już tylko 0.01.

Oscylator harmoniczny

Przypadek oscylatora harmonicznego jest bardzo ważny w fizyce (wiele układów można z dobrym przybliżeniem traktować właśnie jak oscylatory harmoniczne).

W przypadku klasycznym oscylatora harmonicznego, energia potencjalna

$$U(x) = \frac{kx^2}{2} = \frac{m\omega_{kl}^2 x^2}{2}.$$

Cząstka wykonuje drgania harmoniczne o częstości kołowej

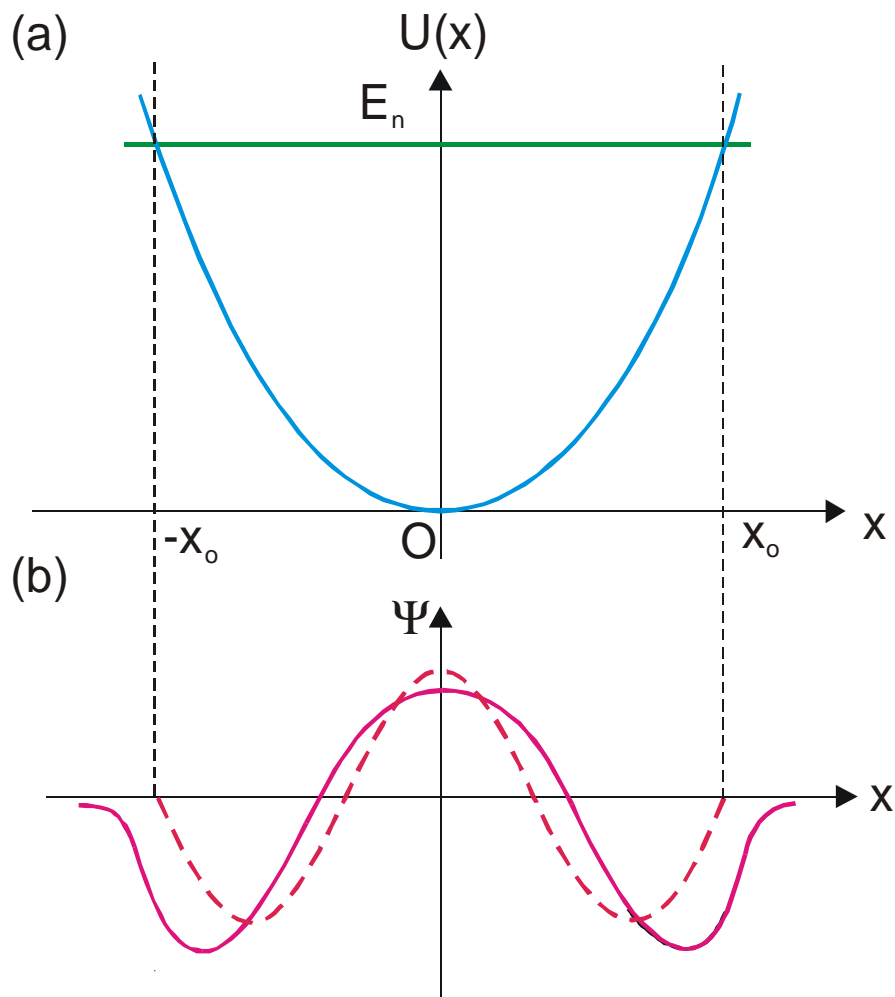
$$\omega_{kl} = \sqrt{\frac{k}{m}},$$

a jej energia może przyjmować dowolne wartości, w tym również wartość zerową.

Jak się przekonamy, w mechanice kwantowej istnienie warunków granicznych przy dużych $|x|$ prowadzi do tego, że dozwolony jest jedynie zbiór energii

$$E_n = \left(n - \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_{kl}$$

gdzie n jest liczbą całkowitą dodatnią.



Rys. 11.13: (a) Energia potencjalna oscylatora harmonicznego; (b) Fala stojąca trzeciego rzędu (linia ciągła – rozwiązanie dokładne, linia przerywana – rozwiązanie przybliżone).

Przed bezpośrednim zastosowaniem równania Schrödingera, przeprowadzimy przybliżone obliczenia. Zilustrują one podstawy metody obliczeń kwantowomechanicznych.

Spróbujmy rozwiązać to zadanie analogicznie do zadania z cząstką w studni. Z rys. 11.13 mamy, że długość studni wynosi $L = 2x_0$, gdzie x_0 jest maksymalnym wychyleniem czyli amplitudą drgań. W przypadku fali stojącej n -tego rzędu na odcinku o długości L , nałoży się n półfal

$$\frac{nL_n}{2} = 2x_0$$

lub

$$L_n = \frac{4x_0}{n}$$

Średnia wartość pędu

$$\langle p \rangle = \frac{h}{L} = \frac{h}{\frac{4x_0}{n}} = n \frac{h}{4x_0}$$

Średnia energia kinetyczna

$$\langle K \rangle = \frac{\langle p \rangle^2}{2m} = \frac{n^2 h^2}{32m x_0^2}$$

Całkowita energia E jest dwa razy większa

$$E = \frac{n^2 h^2}{16m x_0^2}$$

i jest także równa maksymalnej energii potencjalnej

$$E = \frac{1}{2} m \omega_{kl}^2 x_0^2$$

Mnożąc dwa ostatnie równania, otrzymujemy

$$E^2 = \frac{n^2 h^2 \omega_{kl}^2}{32}$$

lub

$$E = \frac{p}{2\sqrt{2}} n \hbar \omega_{kl}$$

W granicach dokładności naszych "obliczeń" można przyjąć, że $p/2\sqrt{2} \approx 1$ i wówczas

$$E_n \approx n \hbar \omega_{kl},$$

gdzie $n = 1, 2, 3$

Przeprowadzimy teraz dokładne obliczenia stosując równanie Schrödingera. Podstawiając do równania Schrödingera $U = (1/2)mw_{kl}^2x^2$, otrzymujemy

$$\frac{d^2Y}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{1}{2}mw_{kl}^2x^2 \right) Y \quad (11.25)$$

Odgadujemy rozwiązanie przyjmując funkcję falową w postaci

$$Y(x) = e^{-ax^2}$$

Obliczając drugą pochodną

$$\frac{d^2Y}{dx^2} = -2ae^{-ax^2} + 4a^2x^2e^{-ax^2}$$

i podstawiając do równania (11.25), mamy

$$(-2a + 4a^2x^2)e^{-ax^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{1}{2}mw_{kl}^2x^2 \right) e^{-ax^2}$$

$$-2a + (4a^2)x^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2} + \left(\frac{m^2w_{kl}^2}{\hbar^2} \right) x^2$$

Przyrównując współczynniki przy x^2 , mamy

$$4a^2 = \frac{m^2w_{kl}^2}{2}$$

$$a = \frac{mw_{kl}}{2}$$

Z porównania członów wolnych wynika

$$-2a = -\frac{2mE}{\mathbf{h}^2}$$

$$E = \frac{\mathbf{h}^2 a}{m} = \frac{\mathbf{h}^2}{m} \frac{mw_{kl}}{2\mathbf{h}} = \frac{\mathbf{h}w_{kl}}{2}$$

Widzimy, że funkcja Gaussa jest rozwiązaniem pod warunkiem, że

$$E_1 = \frac{1}{2} \mathbf{h}w_{kl}$$

W tym przypadku

$$Y_1(x) = \exp\left[-\left(\frac{mw_{kl}}{2\mathbf{h}}\right)x^2\right]$$

Przez podstawienie do równania (11.25) można przekonać się, że rozwiązaniem odpowiadającym fali stojącej drugiego rzędu będzie

$$Y_2(x) = x \exp\left[-\left(\frac{mw_{kl}}{2\mathbf{h}}\right)x^2\right]$$

Funkcja ta jest rozwiązaniem tylko wtedy gdy

$$E_2 = \frac{3}{2} \mathbf{h}w_{kl}$$

Odległość energetyczna pomiędzy dwoma sąsiednimi poziomami wynosi

$$E_2 - E_1 = \mathbf{h}w_{kl}.$$

Odnosi się to również do bardziej wysokich poziomów energetycznych opisanych wyrażeniem

$$E_n = \left(n - \frac{1}{2} \right) \mathbf{h}w_{kl}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (11.26)$$

Oscylator harmoniczny emituje fotony, których częstotliwość jest zgodna z częstością oscylatora klasycznego kiedy przejścia zachodzą pomiędzy sąsiednimi poziomami.

Jeżeli mamy zbiór oscylatorów harmonicznych, jak to jest np. w ciele stałym, to wymiana energii między nimi może odbywać tylko kwantami o energii $\mathbf{h}w_{kl}$. Widmo wartości energii jest dyskretne.

Zauważmy ponadto, że oscylator kwantowy nie może mieć energii równej zero. Najmniejszej energii, równej $\mathbf{h}w_{kl}/2$, nie może przekazać na zewnątrz; oscylator harmoniczny posiada ją nawet w temperaturze zera bezwzględnego. Jest to konsekwencją zasady nieoznaczoności. Gdyby bowiem energia była zerowa i drgania nie występowały, to byłby możliwy jednoczesny pomiar położenia i pędu.