

Приложения на стационарното уравнение на Шрьодингер

Ще приложим стационарното уравнение на Шрьодингер за няколко частни случая.

Движение на свободна микрочастица

За *свободна микрочастица* в квантовата механика се приема всяка частица, която се движи с постоянна скорост v (напр. по оста X) в пространството и не притежава потенциална енергия ($U(r) = 0$). Стационарното уравнение на Шрьодингер за такава микрочастица в едномерен случай има вида

$$(1) \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi = 0,$$

където $E = T$ е пълната енергия на частицата ($U = 0$). Кинетичната енергия T може да представим чрез вълновото число k , като използваме съотношението за импулса: $p = \hbar k$. Тогава

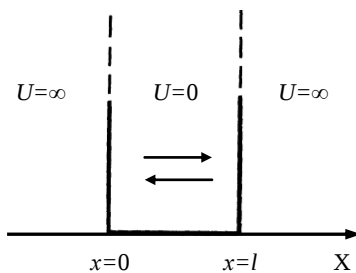
$$(2) E = T = \frac{mv^2}{2} = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}.$$

Изразът (2) определя пълната енергия на свободната частица. Тъй като на вълновото число k не се налагат никакви ограничения (то може да заема произволни стойности), енергията на свободната частица също може да заема всякакви стойности. Следователно нейният енергетичен спектър е непрекъснат. Ако заместим (2) в (1), уравнението на Шрьодингер ще придобие следния вид:

$$(3) \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + k^2 \psi = 0.$$

Общото решение на (3) има вида $\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ и може да се представи като сума от две решения: $\psi_1(x) = Ae^{ikx}$ и $\psi_2(x) = Be^{-ikx}$ (A и B са константи, а $i = \sqrt{-1}$ е имагинерната единица). От физична гледна точка двете решения представляват две монохроматични плоски вълни, които се разпространяват в две противоположни посоки: една по OX с амплитуда A и втора по $-OX$ с амплитуда B .

Движение на микрочастица в потенциална яма



фиг. 1

Ако микрочастицата се намира в едномерна правоъгълна енергетична яма с безкрайно високи стени (фиг. 1), тя има потенциална енергия $U(x) = 0$ в границите на ямата и $U(x) = \infty$ извън тях. Такава яма се нарича *потенциална яма*. При тези условия частицата не може да излезе от ямата, поради което при $x \leq 0$ и $x \geq l$ трябва да е изпълнено $\psi(x) = 0$; това са граничните условия за вълновата функция $\psi(x)$. Уравнението на Шрьодингер за движението на частицата в потенциалната яма ще бъде (3), тъй като и в този случай потенциалната ѝ енергия $U = 0$. Общото решение на това уравнение също ще бъде от вида

$$(4) \psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}.$$

За разлика от първия случай, който беше разгледан (свободна частица), тук имаме наложени ограничения на получената вълнова функция, свързани с граничните условия. Както беше отбелязано преди, вълновата функция трябва да бъде непрекъсната и еднозначна. Следователно стойността на (4) на границите на трите области също трябва да е равна на нула: $\psi(0) = \psi(l) = 0$. За $x = 0$ от (4) се получава $A + B = 0$; $B = -A$. Тогава

$$(5) \psi(x) = A(e^{ikx} - e^{-ikx}) = A_1 \sin kx,$$

където $A_1 = 2iA$. Тъй като (5) трябва да е равна на нула и за $x = l$, е необходимо $\psi(l) = A_1 \sin kl = 0$. В такъв случай $\sin kl = 0$, следователно $kl = n\pi$, където n е цяло число, заемащо стойности $n = 1, 2, 3, \dots$. Така в случая на частица в потенциална яма за вълновото число k получаваме условието

$$(6) k = \frac{n\pi}{l},$$

от което следва, че k заема само определени стойности в зависимост от цялото число n . Пълната енергия на частицата можем да изразим чрез съотношението (2), замествайки k с (6):

$$(7) E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ml^2} n^2.$$

Тъй като енергията на частицата се изменя в зависимост от цялото число n , в (7) е записан индекс n . Горното уравнение изразява важен резултат: енергията на микрочастицата, намираща се в потенциална яма, може да заема само дискретни стойности E_1, E_2, E_3 и т.н. Тези стойности се наричат *енергетични*

нива, а числото n – главно квантово число. Изводът е, че енергията на частицата се квантува, а енергетичният ѝ спектър е дискретен.

Общото решение (5) на уравнението на Шрьодингер също може да се представи като функция на квантовото число n :

$$(8) \psi_n(x) = A_1 \sin\left(\frac{n\pi}{l}x\right).$$

Вълновите функции $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n$, описващи състоянията на микрочастицата в ямата при различни стойности на n , се наричат *собствени вълнови функции*. Константата A_1 може да се определи от условието за нормировка на вълновата функция, като се има предвид, че пространството, в което може да се движи частицата е ограничено от 0 до l :

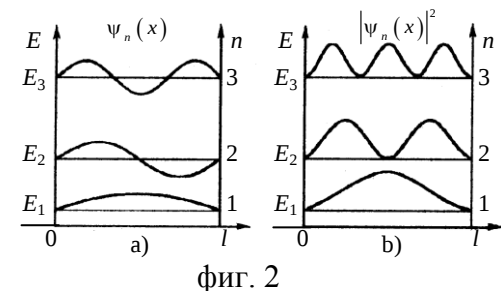
$$\int_0^l |\psi_n|^2 dx = A_1^2 \int_0^l \sin^2\left(\frac{n\pi}{l}x\right) dx = 1; \quad A_1 = \sqrt{\frac{2}{l}}.$$

Тогава решението (8) придобива окончателно вида

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

Знаем, че на всяка движеща се микрочастица съответства дължина на вълната на дьо Бройл. Тогава можем да определим λ_n за частицата, намираща се в потенциалната яма за всяка стойност на числото n :

$$\lambda_n = \frac{h}{mv_n} = \frac{h}{\sqrt{2mE_n}} = \frac{hl}{n\pi\hbar} = \frac{2l}{n},$$



фиг. 2

където енергията E_n е заместена с израза (7). Очевидно е, че λ_n зависи обратнопропорционално от главното квантово число n . Максималната дължина е при $n = 1$: $\lambda_{\max} = 2l$, а широчината на ямата съответно е $l = \lambda_{\max}/2$. При $n = 2$ $\lambda_2 = l$; при $n = 3$ $\lambda_3 = 2l/3$, а $l = 3\lambda_3/2$ и т.н. От това следва, че по дължината на ямата могат да се разположат цяло число полувълни на дьо Бройл (фиг. 2а). Знаейки вълновите функции на отделните състояния, можем да пресметнем и съответните плътности на вероятностите $|\psi_n|^2$, които са представени графично на фиг. 2б:

$$|\psi_n(x)|^2 = \frac{2}{l} \sin^2\left(\frac{n\pi}{l}x\right).$$

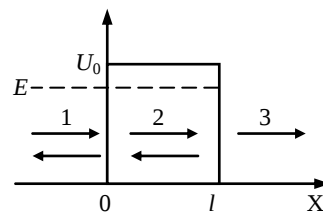
Според условието на задачата в краищата на ямата е изпълнено $|\psi_n|^2 = 0$ (при $x = l$ и $x = 0$), т.е. вероятността частицата да бъде там е равна на нула. За различните точки вътре в ямата вероятността е различна и се изменя в зависимост от n . Следователно в различните състояния на частицата вероятността да я намерим в дадена точка се изменя. В едни точки тя е максимална, а в други – равна на нула, т.е. в тях частицата не може да съществува. Такова поведение е несъвместимо с класическото понятие траектория на частица. Според класическата механика вероятността да намерим частицата в коя да е точка е еднаква и не зависи от нейната енергия. Но при големи стойности на n (големи енергии и малки дължини на вълната λ_n) броят на вълните, които се нанасят върху широчината на ямата, става много голям и точките, в които може да се открие частицата, се разполагат много близко една до друга; в такъв случай с еднаква вероятност може да намерим частицата във всяка точка от интервала $(0, l)$. С други думи, при големи стойности на енергията ($n \rightarrow \infty$) микрочастиците не проявяват вълновите си свойства ($\lambda_n \rightarrow 0$) и резултатите от квантовата механика съответстват на тези от класическата физика.

Ако размерите на потенциалната яма са големи, дискретността на енергетичния спектър става незабележима и той в действителност се превръща в непрекъснат. Обратно, при размери на ямата, сравними с атомните размери, се проявява дискретният характер на енергетичния спектър на частицата. Следователно при преход от света на микрочастиците към макросвета принципите на квантовата механика се превръщат в класическите закони.

Преминаване на микрочастица през потенциална бариера. Тунелен ефект

Нека областта, в която се движи дадена микрочастица, е разделена на две части от потенциална бариера с широчина l и височина U_0 , както е показано на фиг. 3. Според принципите на класическата механика, ако частицата има пълна енергия $E > U_0$, тя ще премине над бариерата, а ако нейната енергия е $E < U_0$, тя не може да премине. Вълновата картина на движението на микрочастицата, която се описва

от уравнението на Шрьодингер в квантовата механика, довежда до твърде различен резултат. Според квантовата механика съществува вероятност, различна от нула, частицата да премине през потенциалната бариера и при енергия $E < U_0$. Разделяме пространството, в което може да се окаже частицата, на три области: **1** ($x < 0$), **2** ($x \in (0, l)$) и **3** ($x > l$). Стационарното уравнение на Шрьодингер за областите **1** и **3** (за които $U = 0$) ще бъде



фиг. 3

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi = 0,$$

а за областта **2** (където $U = U_0$):

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0) \psi = 0.$$

Общите решения на горните уравнения за трите области са

$$(9) \quad \begin{aligned} \psi_{1,3}(x) &= A_{1,3} e^{ik_1 x} + B_{1,3} e^{-ik_1 x}; \\ \psi_2(x) &= A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x}, \end{aligned}$$

където A_1, A_2, A_3 и B_1, B_2, B_3 са константи; $k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar$, а $k_2 = \sqrt{2m(E - U_0)}/\hbar$ е имагинерно число, ако разглеждаме случая $E < U_0$. Тогава, полагайки $k_2 = ik$, където $k = \sqrt{2m(U_0 - E)}/\hbar$, за решението $\psi_2(x)$ получаваме

$$(10) \quad \psi_2(x) = A_2 e^{-kx} + B_2 e^{kx}.$$

Всяко от решенията (9) се състои от два члена, които описват две монохроматични вълни, разпространяващи се в двете възможни посоки: **OX** и **-OX**. Напр. вероятността да открием частицата при движението ѝ към преградата се определя от $|A_1|^2$, а вероятността да намерим частицата при движението ѝ в обратна посока от $|B_1|^2$. Отношението на тези две вероятности се нарича *коэффициент на отражение* на бариерата и се означава с R :

$$R = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2}.$$

Този коэффициент определя вероятността микрочастицата да се отрази от потенциалната бариера. Областта **3** се простира от l до $+\infty$, поради което в нея няма отразена вълна, т.е. константата $B_3 = 0$. В такъв случай решението (9) за областта **3** придобива вида $\psi_3(x) = A_3 e^{ik_1 x}$ и съответства на преминалата през бариерата вълна, която се разпространява само в положителната посока **OX**. Величината, която се определя от отношението на квадрата на амплитудата на преминалата през бариерата вълна към квадрата на амплитудата на падащата вълна, се нарича *коэффициент на прозрачност* на бариерата и се означава с D :

$$D = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2}.$$

Между величините R и D съществува зависимостта $R + D = 1$.

От израза (10) се вижда, че когато микрочастицата има енергия $E < U_0$, вероятността тя да премине през бариерата (т.е. да се намира в тази област **2**) е различна от нула. Тази различна от нула вероятност показва, че поведението на микрочастиците, разглеждани в квантовата механика, е по-различно от това на частиците в класическата физика.

За правоъгълна потенциална бариера с ширина l коэффициентът на прозрачност D се определя от следната формула:

$$D = D_0 e^{-2kl} = D_0 e^{-\frac{2l}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}},$$

където $k = \sqrt{2m(U_0 - E)}/\hbar$ (при $E < U_0$), D_0 е коэффициент със стойност, близка до единица, а m е масата на частицата. Вижда се, че коэффициентът на прозрачност D зависи от величините m, l и разликата в енергиите $(U_0 - E)$, като с нарастването им вероятността за преминаване на частицата през бариерата намалява. Оттук отново следва изводът, че за макротелата квантовата механика преминава в класическата: частиците с голяма маса не преминават през бариерата. Преминаването на микрочастица през потенциална бариера се нарича *тунелен ефект*.