Национальный исследовательский университет
Высшая Школа Экономики

курс-майнор 2017-2018 уч.года
«Квантовая физика 'для чайников'»

В.Н.Глазков

Лекция 7

Простейшие формальные задачи квантовой механики. Оптические аналогии этих задач.

Оглавление

Список литературы

Уравнение Шредингера (повторение)

Для того, чтобы понять как всё же физики описывают микромир нам понадобится немного познакомиться с формализмом квантовой теории. Это описание не строгое, его цель состоит в том, чтобы просто показать, что такой формализм существует и показать его применение на нескольких простых примерах. Математические детали могут быть пропущены, мы постараемся подчеркнуть смысл получаемых результатов на качественном уровне.

Итак, раз мы описываем состояние частицы на языке статистики, то и эволюция состояния частицы во времени должна тогда описываться тоже на языке вероятностей — как изменение волновой функции со временем. Самая простая форма такой записи: $i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=\hat{H}\Psi$, где $\hat{H}$ – некоторый *оператор*, действующий на волновую функцию, i — мнимая единица[1], а $\hbar$ — постоянная Планка (которая пока вписана сюда нашим произволом). Это уравнение называют *нестационарным уравнением Шредингера*.

Понятие оператора пришло из математики и не является специально сложным. Мы, например, привыкли к вычислению различных функций от численного аргумента. Например, при $x=\pi/3$ мы можем легко вычислить функцию $\cos(x)=1/2$. Такие «привычные» функции берут в качестве своего аргумента некоторое число, и получают из него другое число. Программисты могут вспомнить функции, определяемые в программе, которые могут иметь аргументы разных типов и возвращать значение совсем другого типа. Оператор — это функция, действующая на функцию, результатом действия которой является другая функция.

Например, можно определить дифференциальный оператор $\hat{A}=\frac{d}{dx}$, тогда для функции $f(x)=\cos(x)$ можно вычислить $\hat{A}f(x)=\frac{d}{dx}\cos(x)=-\sin(x)$.

Для каждого оператора существует некоторый набор *собственных функций* $f_{собств}$, для которых верно уравнение $\hat{A}f_{собств}=\mathrm{A}f_{собств}$, где A — некоторое число. Например, для простого дифференциального оператора $\hat{A}$ такими собственными функциями являются функции вида $e^{\mathrm{A}x}$.

Можно заметить, что если в нестационарное уравнение Шредингера подставить собственную функцию оператора $\hat{H}$, удовлетворяющую *стационарному уравнению Шредингера* $\hat{H}\Psi=E\Psi$, то мы получим уравнение $i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=E\Psi$. Тогда зависимость волновой функции от времени имеет вид $\Psi(x,t)=A(x)e^{-iEt/\hbar}$. Тогда по свойству модуля комплексной экспоненты плотность вероятности $|\Psi|^2$ от времени не зависит! Состояние описываемое такой волновой функцией соответствует неизменному во времени распределению вероятности — именно такое состояние имеет смысл стационарного

1 Мнимой единицей называется число i , такое что $i^2=-1$. Мнимым числом называются числа вида $a+ib$, для них можно определить операции сложения и умножения с учётом определения мнимой единицы. Мнимые числа могут быть визуализованы как вектора на плоскости, где их действительная часть (a) откладывается по оси X, а мнимая часть (b) - по оси Y. Модулем комплексного числа называется длина такого вектора $\sqrt{a^2+b^2}$. Для нас будет важно следующее математическое свойство: может быть определена экспонента с мнимым показателем $e^{ix}=\cos(x)+i\sin(x)$, модуль такого числа тождественно равен 1.

состояния в квантовой механике.

Стационарное состояние классифицируется некоторым числом E . Это состояние неизменно во времени, то есть можно говорить, что число E — сохраняющаяся величина. Но в физике есть всего один скалярный закон сохранения — это закон сохранения энергии. Следовательно, это число должно быть связано с энергией. Более строгое рассмотрение показывает, что это число и есть полная энергия частицы. Тогда и оператор $\hat{H}$ — это оператор энергии частицы: $\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+U(\vec{r})$, где $\hat{p}$ — оператор импульса.

Для определения (угадывания, с учётом нестрогости нашего курса) оператора импульса можно заметить следующее. Мы понимаем, что правильное описание квантовой частицы должно описать ее волновые свойства. То есть, связь между импульсом частицы и её волновой функцией должна быть той же, что и у обычных волн. Зависимость амплитуды волны от координаты имеет вид $\cos(kx)$ или $\sin(kx)$ в зависимости от начальной фазы. Импульс кванта волны равен $\hbar k$. Объединяя общий вид волны в комплексную форму e^{ikx} получаем, что оператор импульса, дающий правильные собственные значения импульса это $\hat{p}_x=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$.

Окончательно, для простейшего случая частицы всего с одной координатой получаем вид оператора энергии (гамильтониана):

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

Эти рассуждения замыкают цепочку, позволяющую формализовать задачу о вычислении уровней энергии квантовой системы.

Решение простейших задач квантовой механики

Здесь мы будем рассматривать только задачи с одной координатой, одномерные задачи. Цель этих решений, показать, что формальные задачи квантовой механики не являются чем-то непостижимым. Однако от слушателей курса не требуется овладеть этими методами в полном объёме. Наша цель — показать, что формализм работает. Это аналогично тому, как мы, в принципе, понимаем, что законы Ньютона плюс закон всемирного тяготения позволят описать движение планет, но при этом мы не обязательно можем написать все необходимые уравнения и решить их. В то же время, знание о том, что такое вычисление возможно позволяет нам воспринимать мир более предсказуемым и менее полным чудес.

Свободная частица

Рассмотрим самый простой случай — движение свободной частицы. Тогда $U=0$ и стационарное уравнение Шредингера имеет вид

$$\begin{aligned} &-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}=E\psi \\ &\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{2mE}{\hbar^2}\psi=0 \end{aligned} \quad .$$

Уравнение похоже на уравнение гармонических колебаний. Его решениями являются $\sin(kx)$, $\cos(kx)$, либо в комплексном виде $e^{\pm kx}$, где $k=\frac{2mE}{\hbar^2}$. Объединяя это с уже известным решением нестационарного уравнения Шредингера для зависимости волновой функции от времени получим (тут удобнее комплексная форма) $\Psi(x,t)=e^{i(Et/\hbar\pm kx)}$. Это уравнение бегущей волны с волновым вектором k , два решения соответствуют распространению волны слева направо и справа налево. Длина волны $\lambda=\frac{2\pi}{k}=\frac{2\pi}{\sqrt{2mE/\hbar^2}}=\frac{h}{p}$ совпадает с длиной волны де Бройля. Так что гипотеза де Бройля естественным образом входит в этот формализм.[2]

Отметим также что плотность вероятности $\rho=|\Psi|^2=1$ оказывается постоянна во всём пространстве. То есть в квантовой механике свободная частица оказывается абсолютно делокализована. Это, на самом деле, естественный результат:

- для частицы описываемой найденной волновой функцией точно определён импульс $p=\hbar k$, поэтому по соотношению неопределённостей неопределённость координаты такой частицы бесконечно велика.
- кроме того, можно напомнить известный из волновой оптики (или из свойств преобразования Фурье) факт, что по настоящему монохроматическая волна обязана быть бесконечной во времени и в пространстве

Частица у барьера

Усложним задачу, пусть $U(x)=\begin{cases}0, x<0\\ U_0>0, x>0\end{cases}$. Эта конфигурация называется потенциальным барьером. Пусть на такую «стенку» слева летят частицы с энергией меньше, чем U_0 . С точки зрения классической физики у этих частиц не достаточно энергии, чтобы преодолеть барьер и они должны все отражаться обратно. Обнаружить классическую частицу при x>0 невозможно.

Напишем уравнение Шредингера для такого потенциала. При $x<0$ опять получим

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

Решение этого уравнения имеет вид волны бегущей налево или направо $e^{\pm ikx}$.

При $x>0$ получим

2 Подчеркнём, что формализм уравнений Шредингера — это нерелятивистская квантовая механика. Поэтому в каком-то смысле гипотеза де Бройля не полностью входит в рассматриваемый нерелятивистский формализм, так как она верна и для релятивистских частиц. Формализм релятивистской квантовой механики также построен, но его рассмотрение сильно за рамками нашего курса.

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

Решением этого уравнения является обычная экспонента $e^{\pm\kappa x}$, где $\kappa^2=\frac{2m(U_0-E)}{\hbar^2}$.

Вспоминая, что $|\psi|^2$ это плотность вероятности растущую экспоненту надо отбросить как физически бессмысленную, а вот затухающая указывает на «проникновение» частицы в запрещенную область.

Мы не будем доводить это решение до конца, чтобы не углубляться в математические детали[3]. Отметим, что опять результат оказывается в согласии с тем, что известно в волновой оптике: электромагнитное поле не может мгновенно исчезнуть на границе отражающей поверхности и имеется затухающее вглубь зеркала поле.

Туннельный эффект

У эффекта проникновения волновой функции в классически запрещённую область (в те места, где классическая частица никогда не могла бы оказаться) есть одно важное и интересное следствие.

Предположим, что стенка из предыдущей задачи окажется конечной толщины d :
$$U(x)=\begin{cases} 0, x<0 \\ U_0>0, 0<x<d \\ 0, x>d \end{cases} .$$

Причём эта толщина будет достаточно большой ($\kappa d\gg 1$), так что качественная картина отражения частиц от левой стороны стенки не изменится. Тогда на правой границе возникает малая но ненулевая волновая функция и, следовательно, малая (*но ненулевая!*) вероятность обнаружить частицу на правой границе стенки. Эта вероятность, очевидно, $w\propto e^{-2\kappa d}$. Перейдя с такой небольшой вероятностью через границу, частица оказывается вновь в классически разрешенной области пространства и может свободно двигаться.

Это проникновение через недоступную область пространства называют туннелированием (рисунок 1).

У квантового туннелирования есть также аналогия в волновой оптике, связанная с явлением полного внутреннего отражения (рисунок 2). Пусть луч света падает на границу раздела стекло-воздух со стороны стекла так, что наблюдается полное внутреннее отражение.

3 Требует дополнительного обоснования «сшивка» двух видов решений при $x=0$. Формально мы должны потребовать непрерывность плотности вероятности и отсутствие нефизических скачков импульса (соответствующих в классической физике бесконечной силе). Это эквивалентно требованию непрерывности и гладкости волновой функции. Таким образом, для решения при $x<0$ $\psi=e^{ikx}+a\,e^{-ikx}$ (падающая и отраженная волна), для решения при $x>0$ $\psi=b\,e^{-\kappa x}$ и при $x=0$ получим условия $\begin{cases} 1+a=b \\ ik(1-a)=\kappa b \end{cases}$. Откуда $b=\frac{2}{1-i\frac{\kappa}{k}}$, $a=\frac{1+i\frac{\kappa}{k}}{1-i\frac{\kappa}{k}}$. Можно убедиться, что $|a|=1$, то есть все частицы отражаются от стенки, но в процессе отражения частицы «проникают» под стенку.

Возьмём другую стеклянную пластину с тем же показателем преломления и приложим её плотно к первой. При этом граница раздела пропадает и луч начинает проходить во вторую пластину полностью. Что будет, если между пластинами останется небольшой воздушный зазор? В рамках геометрической оптики кажется, что сколь угодно малый зазор будет приводить к сценарию полного внутреннего отражения. Это кажется физически неправильным, так как возникает резкое изменение поведения луча (всегда *полностью* отражается или проходит) при плавном изменении расстояния между пластинами.

Волновая оптика разрешает вопрос более удовлетворительно: при рассмотрении задачи о распространении электромагнитной волны падающей на границу двух сред в условиях полного внутреннего отражения оказывается, что после отражения возникают *распространяющаяся* вглубь более оптически плотной среды (стекла) отражённая волна и *затухающая* вглубь менее оптически плотной среды прошедшая (преломлённая) волна.

Интенсивность прошедшей волны затухает экспоненциально по мере удаления от границы раздела, поэтому достаточно удалённый наблюдатель её не видит. Но существование такой волны необходимо, так как невозможно по уравнениям электродинамики (по физической природе электромагнитного поля), чтобы с одной стороны нейтральной границы раздела электромагнитное поле присутствовало, а с другой — отсутствовало.

При поднесении второй пластины достаточно близко эта затухающая прошедшая волна проникает вглубь второй пластины (по тем же соображениям непрерывности поля). Но в глубине второй пластины волна оказывается в условиях, в которых она может распространяться без затухания — и, следовательно, превращается в нормальную незатухающую электромагнитную волну. (В этом также можно убедиться обратив ход световых лучей в этих рассуждениях.).

Таким образом, во второй пластине возникает луч света, являющийся продолжением луча света в первой пластине но «отсутствующий» в зазоре между пластинами. Часть первичного луча по прежнему испытывает полное отражение на границе раздела сред, а часть «туннелирует» через зазор во вторую пластину.

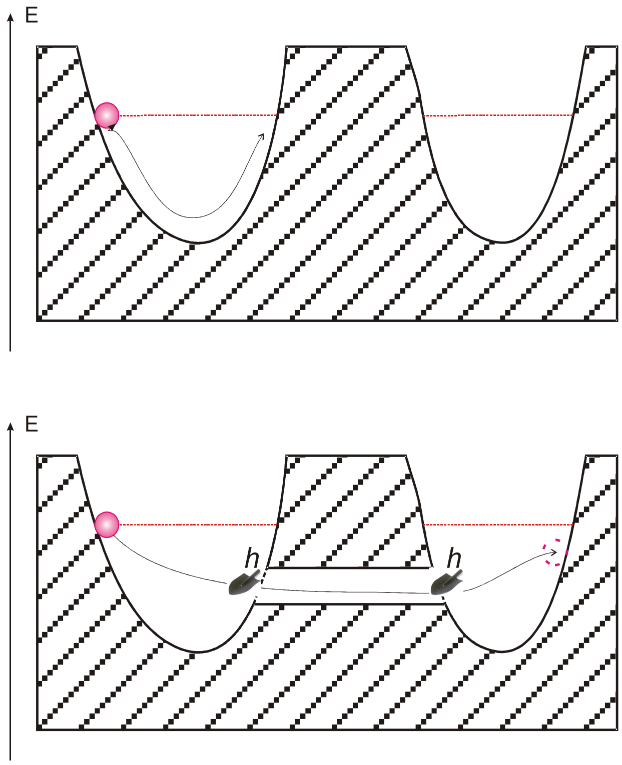

Рисунок 2: Схематическое изображение туннелирования между состояниями. Верхний рисунок: две классических потенциальных ямы. Нижний рисунок: проникновение частицы во вторую яму за счёт квантового туннелирования.

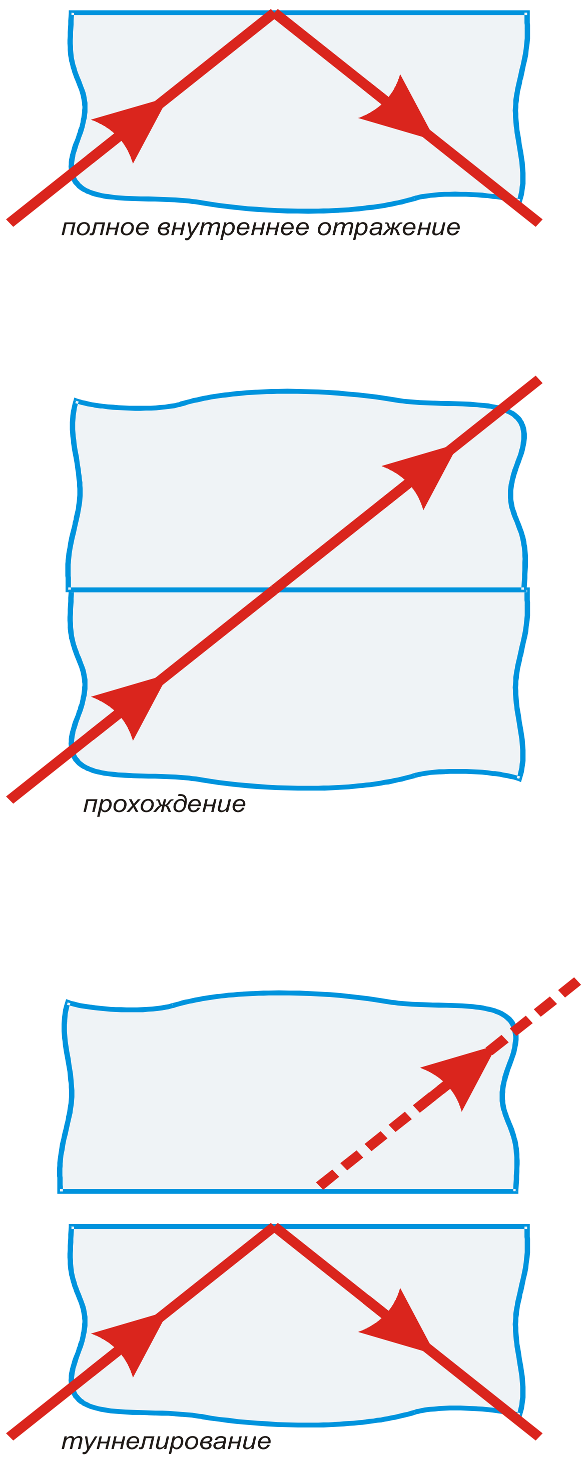

Рисунок 1: Схема туннелирования электромагнитных волн в оптике.

Суперпозиция квантовых состояний

Напомним принцип суперпозиции в теории электричества: если электрическое или магнитное поле создаётся несколькими источниками, то результирующее поле есть сумма вкладов источников. Это свойство связано с линейностью уравнений электродинамики (уравнений Максвелла).

Уравнение Шредингера также линейно: если две волновые функции Ψ_1 и Ψ_2 удовлетворяют уравнению Шредингера $i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=\hat{H}\Psi$, то и любая их линейная комбинация $\Psi=\alpha\Psi_1+\beta\Psi_2$ тоже удовлетворяет уравнению Шредингера и описывает какое-то состояние. Такое смешанное состояние называют суперпозицией состояний Ψ_1 и Ψ_2 . Обратите внимание, что складываются волновые функции, а не вероятности. Например, если $a=b=1$ и в некоторой точке $\Psi_1=1$ и $\Psi_2=-1$, то для каждого из состояний есть вероятность обнаружить частицу в данной точке — а вот для суперпозиции этих состояний вероятность (квадрат модуля волновой функции) окажется нулевой. Фактически, то что мы описали — это и есть интерференция волн. Таким образом, мы приходим к пониманию того, что некоторый волновой процесс, связанный с частицей, введённый де Бройлем — это и есть волны вероятности, описываемые волновой функцией. Наблюдаемая же интерференция электронов — это интерференция волновых функций, доказывающая их реальность.

Квантовые осцилляции

Ранее мы обсуждали возможность туннелирования квантовых частиц. Рассмотрим две квантовых потенциальных ямы, расположенных недалеко друг от друга, схема потенциала показана на рисунке:

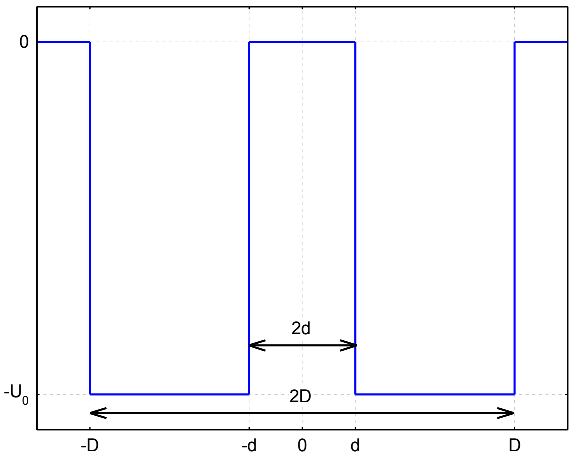

Рисунок 3: График U(x) для двух близких квантовых ям.

В классической физике, частица положенная в одну из ям, всегда в ней остаётся. В квантовой — за счёт туннелирования она может перейти во вторую яму. Это означает, что в «по-настоящему» стационарном квантовом состоянии вероятность обнаружить частицу слева и справа должна быть одинаковой.

Если ямы связаны слабо друг с другом, то можно угадать ответ пользуясь малостью вероятности туннелирования между ямами (рисунок 4). Волновые функции в состоянии с одинаковой энергией (с минимальной энергией для наших рассуждений) устроены одинаково, назовём их ψ_1 и ψ_2 . Полная волновая функция для системы двух ям должна воспроизводить распределение вероятности внутри одной из ям и при этом в силу симметрии потенциала (соображения симметрии очень важны в физике!) полное распределение вероятности $|\Psi|^2$ должно быть чётной функцией координаты (мы выбрали ноль отсчёта точно посередине между ямами, рисунок 3).

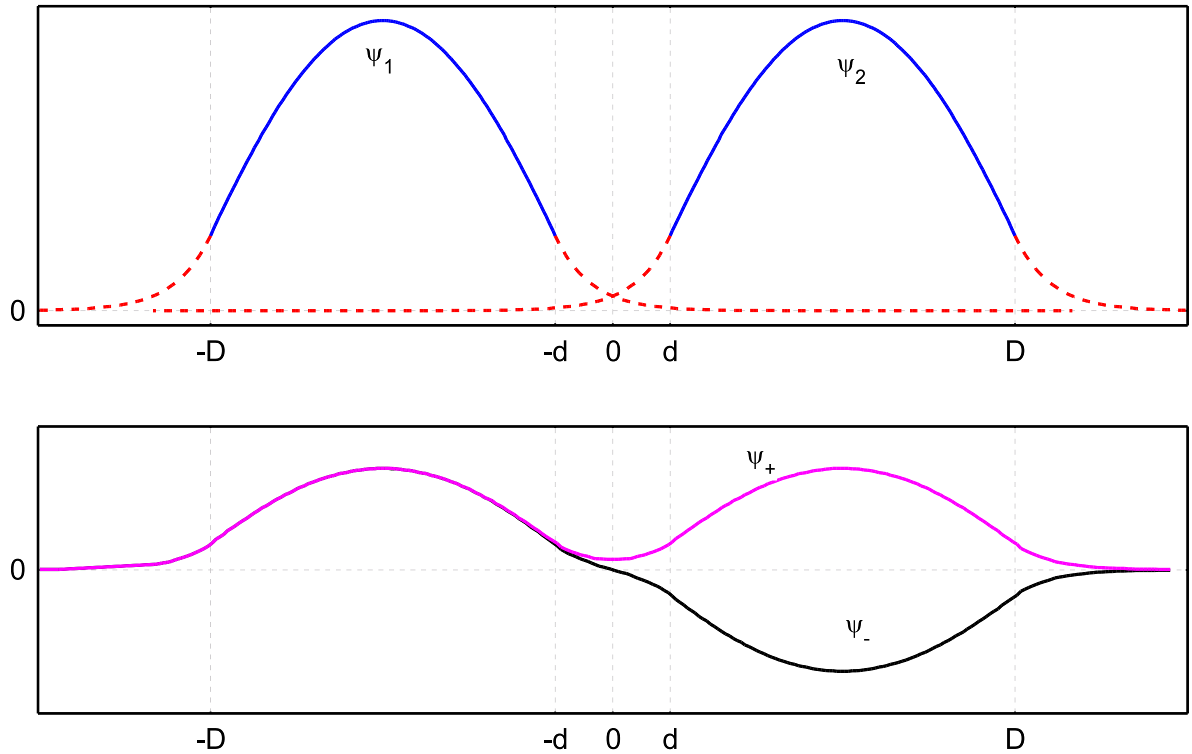

Рисунок 4: Верхняя панель: Волновые функции ψ_1 *и* ψ_2 *исходного приближения, пунктиром показаны волновые функции в классически запрещённых областях под барьером. Нижняя панель: чётная и нечётная комбинация исходных волновых функций.*

Поэтому сама полная волновая функция должна быть либо чётной, либо нечётной функцией координаты. А это означает, что будет всего два варианта $\Psi_\pm=\psi_1\pm\psi_2$ (рисунок 4). Так как для функций $\Psi_\pm=\psi_1\pm\psi_2$ вероятности обнаружить частицу под разделяющим ямы барьером немного отличаются, то энергии этих состояний окажутся немного разными равными некоторым $E_\pm$, соответственно.

А теперь поставим мысленный эксперимент. Пусть изначально частица была локализована в левой яме. То есть, пусть исходное состояние описывалось волновой функцией ψ_1 . Эта функция не собственная для системы с двумя ямами, её изменение во времени описывается нестационарным уравнением Шредингера. При этом, если других состояний в этой яме нет (такое возможно, но доказывать мы это не будем), то волновую функцию в произвольный момент времени можно представить в виде суперпозиции собственных функций гамильтониана $\psi_\pm$: $\psi(t)=a(t)e^{-iE_+t/\hbar}\psi_+ + b(t)e^{-iE_-t/\hbar}\psi_-$. В исходный момент $t=0$ $a=b=1/\sqrt{2}$, условие нормировки $|a|^2+|b|^2=1$. Далее имеем

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{H}\psi$$

$$a'(t)e^{-iE_+t/\hbar}\psi_+ + b'(t)e^{-iE_-t/\hbar}\psi_-=0$$

решением является $a(t)=b(t)=const=\frac{1}{\sqrt{2}}$, мы полностью угадали временную зависимость, вынеся мнимые экспоненты с энергиями собственных состояний.

Тогда

$$\psi(t)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(e^{-iE_+t/\hbar}\psi_+ + e^{-iE_-t/\hbar}\psi_-\right)=\frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\overline{E}t/(2\hbar)}\left(e^{-i\Delta t/(2\hbar)}\psi_+ + e^{i\Delta t/\hbar}\psi_-\right)$$

где средняя энергия $\overline{E}=(E_+ + E_-)/2$, а расщепление уровней $\Delta=E_+-E_-$. Небольшой перегруппировкой можно получить более наглядную запись

$$\psi(t)=e^{i\overline{E}t/\hbar}\left[\cos\left(\frac{\Delta t}{2\hbar}\right)\psi_1-i\cdot\sin\left(\frac{\Delta t}{2\hbar}\right)\psi_2\right] .$$

Таким образом, если частицу изначально локализовать в одной из ям, то со временем её наблюдаемое положение будет осциллировать. Через время $\frac{\Delta\tau}{2\hbar}=\frac{\pi}{2}$ частица перейдёт в состояние, локализованное в другой яме и так далее.