

1. Математические основы квантовой физики

1.1 Средние значения физических величин

Введем понятие о среднем значении физической величины f в данном состоянии, описываемом волновой функцией Ψ . Соответственно обычному определению средних значений, определим как сумму всех собственных значений f_n данной величины, умноженных каждое на соответствующую вероятность .

Таким образом, квантовый оператор уравнение электрон поле

(1)

Напишем в виде выражения, которое не содержало бы коэффициентов a_n разложения волновой функции Ψ , а зависело от этой функции.

Поскольку в (1) входят произведения $a_n a_n^*$, то ясно, что искомое выражение должно быть билинейным по Ψ и Ψ^* . введем некоторый математический оператор, который обозначим как \hat{F} , и определим следующим образом. Пусть $\hat{F}\Psi$ обозначает результат воздействия оператора \hat{F} на функцию Ψ . Определим \hat{F} так, чтобы интеграл от произведения $\hat{F}\Psi$ на комплексно сопряженную функцию Ψ^* был бы равен среднему значению :

(2)

где dq - обобщенная координата, $dq = dx dy dz$.

Результат воздействия оператора \hat{F} на функцию Ψ имеет вид:

(3)

Таким образом каждой физической величине в квантовой механике соответствует определенный линейный оператор.

Из (3) видно, что если функцией Ψ является одна из собственных функций Ψ_n , при этом все a_n , кроме одного, равны нулю, то в результате воздействия на нее оператора эта функция просто умножается на соответствующее ей собственное значение f_n .

Опуская индекс n , мы можем теперь утверждать, что собственные функции данной физической величины f являются решением уравнения

(4)

Вид оператора может быть определен из непосредственных физических соображений, и тогда уравнение (4) дает возможность находить собственные функции и собственные значения посредством его решения, при требуемых условиях.

1.2 Квантовые операторы

Вид квантовых операторов может быть найден, как указывалось выше из непосредственных физических соображений. Прежде обратимся к основным свойствам математического оператора . Пусть f и g - две физические величины,

могущие одновременно иметь определенные значения, а и их операторы. Собственные значения суммы $f + g$ этих величин равны сумме их собственных значений. Этой новой величине будет, очевидно, соответствовать оператор, равный сумме операторов f и g , что следует из уравнения (4). Если же величины не могут иметь одновременно определенных значений, то в этом случае, необходимо среднее значение их суммы записать, как

и тогда будет справедливо $\langle f + g \rangle = \langle f \rangle + \langle g \rangle$.

Постоянная может быть вынесена за знак оператора, т.е.

Пусть теперь наряду с суммой одновременно определяемых величин f и g , рассматривается их произведение. Легко видеть, что такой величине соответствует оператор, действие которого состоит в последовательном действии на функцию, сначала одного, а затем другого оператора, действительно,

Из приведенного определения следует, что степени операторов представляют операторы, действие которых эквивалентно последовательному действию оператора-основания на данную функцию столько раз, сколько указано в показателе степени.

1.3 Действия с квантовыми операторами

Простейшей физической системой является материальная точка. Запишем основные операторы, действующие на волновую функцию ψ .

Операторы проекций импульса.

(5)

Оператором координат является сама координата, т.е.

(6)

Так как потенциальная энергия U зависит только от координат, то справедливо

(7)

т.е. оператор потенциальной энергии, есть сама потенциальная энергия.

Кинетическая энергия T материальной точки:

следовательно оператор кинетической энергии будет иметь вид

(8)

Оператор полной энергии или оператор Гамильтона

(9)

1.4 Уравнение Шредингера

Волновая функция полностью определяет состояние физической системы в квантовой механике. Это означает, что задание этой функции в некоторый момент времени не только описывает все свойства системы в этот момент времени, но определяет ее поведение также, и во все будущие моменты времени - конечно, лишь с той степенью полноты, которая допускается волновой функцией. Математически это обстоятельство должно заключаться в значении и зависимости этой функции от самой.

Эту задачу в 1926г решил Э. Шредингер. Полученные им уравнения (стационарное и нестационарное) имеют вид:

$$\psi, \quad (10)$$

- это не стационарное уравнение, - и

$$(11)$$

где - E - полная фиксированная энергия.

1.5 Плотность потока вероятности

Уравнение непрерывности. Запишем уравнение комплексно-сопряженное (10):

$$(12)$$

Умножим (10) на *, а (12) - на и вычтем из первого второе. В результате после простых преобразований получим:

$$(13)$$

Рассмотрим второе слагаемое в (13). Выражение в фигурных скобках представим в виде:

$$(14)$$

и, замечая, что , здесь p - импульс, перепишем (14) как

$$(15)$$

где - скорость микрочастицы

Теперь (13) принимает вид

.

Так как * = есть плотность вероятности, а = j - плотность потока вероятности, то имеем:

$$(16)$$

Это уравнение представляет квантомеханическое уравнение непрерывности, а

$$(17)$$

есть плотность потока вероятности.

2. Движение электронов в потенциальных полях

2.1 Свободное движение электронов

Когда в пространстве, где находится электрон, отсутствуют электронные поля, т.е.

$u(x,y,z) = 0$, движение электрона следует считать свободным. Для выполнения особенностей движения в этом случае необходимо решить уравнение (11) при

$$u(x,y,z) = 0$$

Наиболее простое решение получается при одномерном движении, для определенности вдоль оси x (- ? < x < ?).

Решение уравнения Шредингера

$$(18)$$

будет сумма экспоненциальных функций, т.е.

$$\psi, \quad (19)$$

где k - волновое число, .

Первое слагаемое в (19) соответствует волне, распространяющейся слева направо, второе - волне, движущейся справа налево. Это решение остается конечным при всех значениях x при любом вещественном k.

Особенностью решения (19) является то, что в любой точке x электрон с одинаковой вероятностью движется и вправо и влево.

Энергетический спектр свободно движущегося электрона простирается от 0 до $+\infty$ и является непрерывным.

2.2 Квантооразмерные структуры

Наличие у электронов волновых свойств, определяет возможность проявления при их движении чисто волновых явлений, подобных явлениям в оптике, - интерференции, дифракции и др.

В то же время проявление этих свойств зависит от размеров конфигурационного пространства, в котором движется электрон. Размеры пространства в каком-либо направлении должны быть сравнимы с длиной волны де Бройля. Ограничения области движения электронов может быть достигнуто уменьшением физической длины пространства и (или) созданием определенного потенциального рельефа. Когда нет ограничений для движения электронов в направлениях x , y , z в кристалле существует трехмерный электронный газ, свойства которого могут быть описаны законами классической физики с заменой массы электрона на эффективную. Это 3-D квантооразмерная структура.

Если же движение электронов ограничено в каком-либо одном направлении, например, в направлении z , то электрон свободно может перемещаться только в плоскости x , y . Это эквивалентно бесконечно глубокой потенциальной яме. Такая структура является 2-D квантооразмерной (квантовая яма).

При ограничении движения в двух направлениях, электроны могут перемещаться только в оставшемся одном, что похоже на тонкий провод или нить. Это будет 1-D квантооразмерная структура (квантовая нить).

Когда же ограничения наложены на все три направления, возникает 0-D квантооразмерная структура (квантовая точка).

Размеры в направлениях ограничения движения, чтобы эффективно проявлялись квантовые явления, должны лежать в нанометровом диапазоне, менее 100 нм.

2.3 Движение в потенциальной яме

Потенциальная яма представляет такую форму потенциального поля, в котором движение ограничено в каком-либо одном направлении конфигурационного пространства, т.е. это 2-D квантооразмерная структура. Материальным объектом такой структуры является тонкая проводящая пленка толщиной a .

Математическая задача определения состояний (стационарных) движения электрона состоит в решении уравнения Шредингера

$$(20)$$

т.к. $\psi = 0$ при $x = 0$ и $x = a$, а для $0 < x < a$ $\psi = \dots$

Решение уравнения (20) должно удовлетворять условиям: $\psi = 0$ при $x = 0$ и $x = a$, поскольку электрон не может преодолеть бесконечную потенциальную стенку.

Общим решением уравнения (20) при мнимых корнях характеристического уравнения является

(21)

Чтобы удовлетворялись условия на границах потенциальной ямы $x = 0$ и $x = a$, должно выполняться равенство $B = 0$ и $(n = 1, 2, 3, \dots)$.

Нормированные волновые функции стационарных состояний будут иметь вид

(22)

где

Уровни энергии в потенциальной яме определяются выражением

(23)

Из (23) видно, что в бесконечной потенциальной яме энергетический спектр электрона (микрочастицы) имеет дискретный характер, причем дискретность уменьшается с ростом n .

Волновая функция в зависимости от номера n имеет на каждом электронном уровне $(n-1)$ узлов. Это означает, что электрон (микрочастица) с различной вероятностью может находиться в пространстве дна ящика.

При $n = 1$ микрочастица (электрон) с наибольшей вероятностью локализуется вблизи середины ящика, т.е. в точке $x = a/2$. При больших n электрон практически с равной вероятностью может находиться в любой точке отрезка $(0 < x < a)$. Он становится «квазисвободным» (см. п.2.1).

Рассмотрим особенности поведения микрочастицы в потенциальной яме конечной высоты (глубины) потенциальное поле такой ямы в общем виде можно записать следующим образом:

$u(x) = u_1$, при $x < 0$ (область 1);

$u(x) = 0$, при $0 < x < a$ (область 2);

$u(x) = u_2$, при $x > a$ (область 3).

Пусть $u_2 > u_1$, а полная энергия электрона $E < u_1$. Определим электронный спектр энергии в яме.

Волновая функция, являющаяся решением уравнения Шредингера в области 1, и соответствующий волновой вектор (волновое число) будут иметь вид

,

в области 2, т.е. в потенциальной яме,

а в области 3,

Знаки в показателях экспонент связаны с различным направлением движения в этих областях.

В области 1 движение, распространение волны вероятности происходит в отрицательном направлении, $x < 0$, тогда как в области 2 в положительном направлении, $x > a$.

Условие непрерывности u и u' на границах ямы, $x = 0$ и $x = a$, дает уравнения.

или (и)

Исключая из первой группы уравнений или из второй, получим трансцендентное уравнение

(24)

Здесь $n = 1, 2, 3, \dots$, а значения \arcsin берутся между 0 и $\pi/2$. Корни уравнения (24) определяют дискретные уровни энергии

Для каждого n имеется, вообще говоря, один корень; значения n корня нумеруют уровни энергии в порядке их возрастания.

Поскольку аргумент y \arcsin не может превысить 1, то ясно, что значения k могут лежать только в интервале между 0 и $\pi/2$. Левая сторона уравнения (24) есть монотонно возрастающая, а правая - монотонно убывающая функция k . Поэтому для существования корня уравнения (24) необходимо чтобы при $k=0$ правая сторона была меньше левой.

В частности неравенство

$$(25)$$

получающееся при $n = 1$, есть условие того, что в яме существует по крайней мере один уровень энергии. При $u_1 = u_2$ условие (25), очевидно, всегда выполняется.

Из (25) также следует, что при данных u_1, u_2 всегда существуют настолько малые значения ширины ямы a , при которых не будет существовать ни одного дискретного уровня энергии, т.е. частица не будет «захватываться» ямой. Согласно законам классической механики частица всегда будет «захватываться» ямой и совершать финитное движение, лишь бы энергия частицы была достаточно мала.

При $u_1 = u_2 = u_0$ (симметричная яма) уравнение (25) сводится к

$$(26)$$

Введя переменную θ , получим при нечетном n уравнение

$$(27)$$

причем должны браться те корни этого уравнения, для которых $\tan \theta > 0$

При четном n получим уравнение

$$(28)$$

причем надо брать корни, для которых $\tan \theta < 0$

По корням этих двух уравнений определяются уровни энергии число корней (при $a \rightarrow 0$) конечно.

В общем случае, когда $u_1 \neq u_2$, разрешенные значения волнового вектора k , а следовательно и дискретные значения E в яме, находятся численным или графическим решением уравнения (25)

Для неглубокой ямы, в которой $u_1 \approx u_2 \approx u_0$,

имеем $u_1 \approx u_2$ и уравнение (28) не имеет корней вовсе, а уравнение (27) имеет один корень, равный

Таким образом в яме имеется всего один уровень энергии расположенный вблизи ее «потолка».

В случае, когда $u_1 \neq u_2$, полученные выше выражения остаются справедливыми с переменой в них индексов: 1 2 и 2 1.

2.4 Рассеяние на потенциальной стенке

Проведем анализ системы, в которой микрочастицы, испускаемые источником, удаленным на большое расстояние, рассеиваются на той или иной преграде, уходя после этого в бесконечность.

Простейшей моделью данной задачи, соответствующей рассеянию на потенциальной

преграде с большим масштабом неоднородности, является рассеяние на потенциальной стенке:

$u = 0$, при $x < 0$ (область 1);

$u = u_0$, при $x > 0$ (область 2).

Найти состояние микрочастицы в таком потенциальном рельефе позволяет решение уравнения Шредингера

(29)

В области 1, где $u(x) = 0$, решение уравнения (29) соответствует решению для свободной микрочастицы,

(30)

где

В решении (30) константа A_1 определяет амплитуду волны вероятности падающей на стенку, а B_1 - амплитуду отраженной волны.

В области 2 необходимо решить уравнение

(31)

Характер решения этого уравнения зависит от отношения полной энергии электрона (микрочастицы) E и высоты потенциальной стенки u_0 .

В случае $E > u_0$ общее решение (31) имеет вид

(32)

где

Константу B_2 следует положить равной нулю, т.к. в этой области источников рассеяния нет, частица беспрепятственно уходит в бесконечность.

Таким образом, для $E > u_0$

(33)

Физический интерес представляют коэффициенты прохождения и отражения, определяемые отношением плотностей потоков вероятностей падающих, прошедших и отраженных волн де Бройля.

Поток плотности вероятности определяется выражением (17). В падающей волне этот поток равен

(34)

Аналогично для отраженной волны получим

(35)

и для прошедшей волны

(36)

Коэффициент отражения R , равный отношению в соответствии с (34) и (35) имеет вид

(37)

а коэффициент прохождения D (коэффициент прозрачности)

(38)

Упростить выражения для коэффициентов отражения R и прохождения D можно, если найти связь между B_1 и A_1 , а также A_2 и A_1 . Это можно осуществить, используя условия непрерывности волновых функций $\psi_1(x)$ и $\psi_2(x)$ на границе стенки, т.е. при $x = 0$.

Условия непрерывности запишем в следующем виде:

Из этих двух условий и вида функций $\psi_1(x)$ и $\psi_2(x)$ получим

В силу полученных зависимостей коэффициентов B_1 и A_2 от A_1 , можно представить коэффициенты R и D в удобной для анализа форме

(39)

Из (39) следует, что при $E < u_0$ микрочастица имеет вероятность отличную от нуля отразится от потенциальной стенки, причем коэффициенты R и D не зависят от направления движения, а только лишь от отношения E/u_0 .

Этот вывод в корне отличается от классического движения, когда частица, имеющая энергию $E < u_0$ всегда проникает в область над стенкой (область 2).

Качественно полученные результаты справедливы для произвольной потенциальной стенки $u(x)$, при этом всегда выполняется равенство

$$R + D = 1 \quad (40)$$

которое отражает сохранение полного потока микрочастиц.

Рассмотрим ситуацию, когда $E < u_0$, т.е. полная энергия микрочастицы E меньше высоты потенциальной стенки u_0 . В этом случае в области 1 волновая функция совпадает с (30), а в области 2 кардинально изменяется, т.к. K_2 становится мнимым

(41)

где

Выполнив аналогичные выкладки, как для $E < u_0$ для коэффициента отражения получим

(42)

а коэффициент прохождения $D = 0$ в силу (40). Таким образом, при $E < u_0$ микрочастица отражается от потенциальной стенки, а в области стенки поток отсутствует.

Однако, имеется отличная, хотя и малая, вероятность проникновения микрочастицы под потенциальной барьер. В области $x < 0$

Микрочастица как бы проходит внутрь потенциального барьера и возвращается назад, поток отсутствует.

Эффективная глубина проникновения под барьер, где вероятность заметно отлична от нуля, имеет порядок величины $1/k$.