Если спросить меня, что самое важное, что должен утащить студент с введения в кванты и атомки, я отвечу: решать одномерного Шрёдингера.

$$\widehat{H}\Psi(x) = E\Psi(x)$$

т.к. $\widehat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$, а $\hat{p} = -ih * \frac{d}{dx}$, то получаем $\widehat{H} = -\frac{h^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + U(x)$. Получаем

$$-\frac{h^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\Psi(x) + U(x)\Psi(x) = E\Psi(x)$$

В общем случае это ДУ не решается. Однако если $U(x) = const = U$, то решение есть:

$$\frac{h^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\Psi(x) + (E - U)\Psi(x) = 0$$

Если $E > U$, то введём $æ^2 = \frac{2m(E-U)}{h^2}$. Тогда дифур свёдётся к

$$\frac{d^2}{dx^2}\Psi(x) - æ^2\Psi(x) = 0$$

и решение можно записать как

$$\Psi(x) = Ach æx + Bsh æx$$

замечание: иногда вместо æ используют q:

$$q^2 = \frac{2m(E-U)}{h^2}, \Psi(x) = Achqx + Bshqx$$

Если $E < U$, то введём $k^2 = \frac{2m(E-U)}{h^2}$. Тогда дифур свёдётся к

$$\frac{d^2}{dx^2}\Psi(x) + k^2\Psi(x) = 0$$

и решение можно записать как

$$\Psi(x) = A\cos kx + B\sin kx$$

Алгоритм:
1) Нарисовать график U(x). Глядя на него, написать «шаблон» для ВФ
2) Получить систему линейных ур-й, записав условия сшивки.
3) Решить эту систему относительно A,B,C и т.п. Должно получиться уравнение на k и/или q.
4) Выполнив подстановку

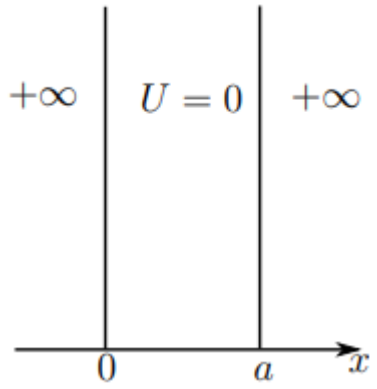
$$k = \frac{\sqrt{2m(E-U)}}{h}, q = \frac{\sqrt{2m(U-E)}}{h}$$

получить искомое уравнение для E, тем самым получив ур-е на E, определяющее спектр энергий.

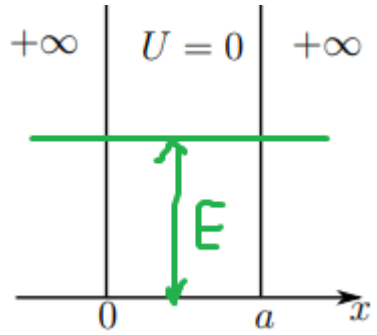
Поймём этот алгоритм на примерах.

Самая простая задача, которая только может быть – на бесконечно глубокую прямоугольную яму. С неё и начнём.

1) Нарисовать график U(x). Глядя на него, написать «шаблон» для ВФ



Пишем заготовку под ВФ. Начнём со средней области. E не может быть <0, потому что во всех точках U(x)>0. Значит, E>0:



и мы пишем заготовку с k:

$$\text{при } 0 \le x \le a \; \Psi(x) = A\cos kx + B\sin kx$$

А что в крайних областях? Т.к. там потенциал равен $+\infty$, это означает, что там Ψ(x)=0 (т.е. вероятность найти там частицу =0). Получаем

$$\text{при } x \le 0 \text{ или } a \ge x \; \Psi(x) = 0$$

У нас готов шаблон:

$$\begin{cases} x \le 0 & \Psi(x) = 0 \\ 0 \le x \le a & \Psi(x) \quad A\cos kx + B\sin kx \\ a \ge x & \Psi(x) = 0 \end{cases}$$

п.1 выполнен.

Наши решения верны каждое на своём участке, но их нужно сшить. Этому посвящён второй пункт:

2) Получить систему линейных ур-й, записав условия сшивки

Условия сшивки: На границе областей непрерывна как ВФ (всегда!) и, если U(x) меняется на конечную величину, ещё её первая производная ВФ.

В данной задаче U(x) в точках 0 и a меняется на бесконечную величину, поэтому непрерывна лишь сама ВФ.
В точке x=0 сшиваем два наших решения:

$$0 = A\cos 0 + B\sin 0$$

И в точке x=a:

$$A\cos ka + B\sin ka = 0$$

Получили систему:

$$\begin{cases} A\cos 0 + B\sin 0 = 0 \\ A\cos ka + B\sin ka = 0 \end{cases}$$

3) Решить эту систему относительно A,B,C и т.п. Должно получиться уравнение на k и/или q.

Получаем A=0, B любое, $\sin ka = 0$, что равносильно $ka = \pi n, k = \frac{\pi n}{a}$.

Прежде чем мы пойдём дальше. давайте поймём, что значит «B любое». Это как понимать? Оказывается, мы не записали ещё одно уравнение – условие нормировки:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi^2(x)|dx = 1$$

И из него при необходимости мы можем вытащить B. Просто как правило (в частности, если мы ищем именно энергетический спектр) оно нам не нужно. Но если что – нужно иметь в виду.

4) Выполнив подстановку

$$k = \frac{\sqrt{2m(E-U)}}{h} \text{ (в данной задаче } U = 0, k = \frac{\sqrt{2mE}}{h}\text{)}$$

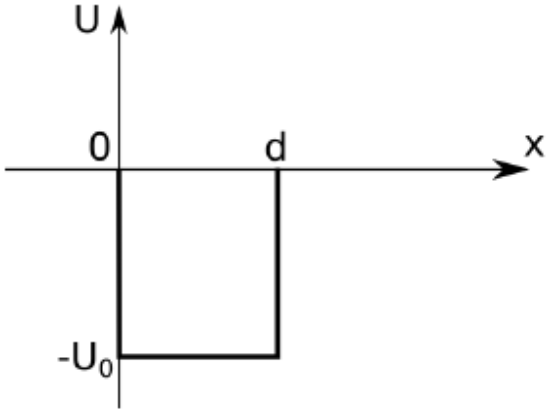
получить искомое уравнение для E, тем самым получив ур-е на E, определяющее спектр энергий.

Профит:

$$\frac{\sqrt{2mE}}{h} = \frac{\pi n}{a}$$

$$E = \frac{\left(\frac{\pi n h}{a}\right)^2}{2m}$$

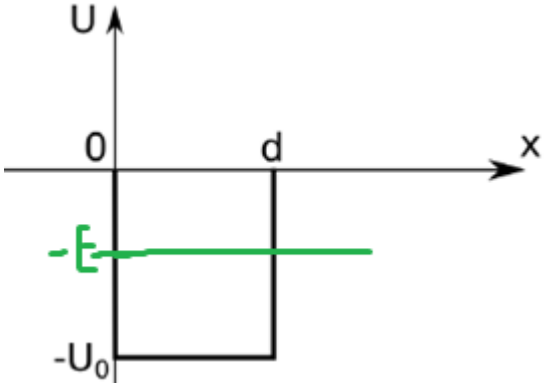
Следующая задача с областью конечной глубины:



$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ -U_0, & 0 < x < d \\ 0, & x > d \end{cases}$$

«Почему я не разбираю на лекции задачу с ямой конечной глубины, оставляя её бедным семинаристам? Потому что она не имеет аналитического решения» (Николай Викторович Клёнов, лектор по атомке)

Поймём, где на этом графике уровень E. Может ли быть $E < -U_0$? Нет, E не может быть ниже минимума. Может ли бы быть больше? Да. Но тогда это будет свободное состояние – частица пролетит над ямой. Нас интересует связанное состояние: $-U_0 < E < 0$



Уяснив это, пишем заготовку под ВФ:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{qx}, & x < 0 \\ Be^{-ikx} + Ce^{ikx}, & 0 < x < d \\ De^{-qx}, & x > d \end{cases}$$

Почему она такая? Потому что в центральной области $E > U$, поэтому там k, а в крайних $E < U$, поэтому там q.

А почему в крайних областях одно слагаемое, а не два? А это граничные условия:

$$\Psi(-\infty) = \Psi(\infty) = 0$$

2) Получить систему линейных ур-й, записав условия сшивки

Условия сшивки: На границе областей непрерывна как ВФ (всегда!) и, если U(x) меняется на конечную величину, ещё её первая производная ВФ.

В данной задаче U меняется на конечную величину, поэтому условия сшивки пишем как на ВФ, так и на её производную.

$$\begin{cases} A = B + C, & x = 0 \\ qA = -ikB + ikC, & x = 0 \\ Be^{-ikd} + Ce^{ikd} = De^{-qd}, & x = d \\ -ikBe^{-ikd} + ikCe^{ikd} = -qDe^{-qd}, & x = d \end{cases}$$

3) Решить эту систему относительно A,B,C и т.п. Должно получиться уравнение на k и/или q.

Система из 4 линейных уравнений с 4 неизвестными будет иметь решение, если определитель соответствующей матрицы равен 0. Отсюда получаем условие на собственные значения энергии:

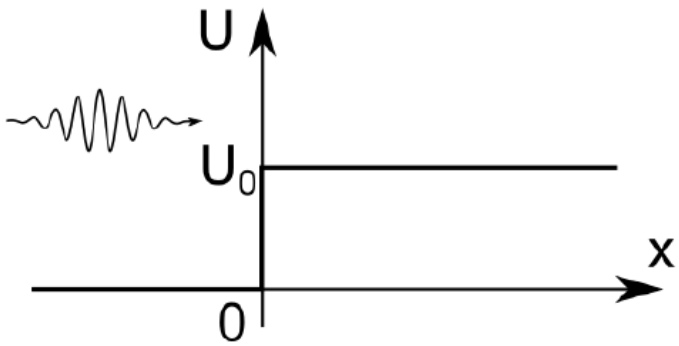
$$0 = \Delta = \begin{vmatrix} 1 & -1 & -1 & 0 \\ q & ik & -ik & 0 \\ 0 & e^{-ikd} & e^{ikd} & -e^{-qd} \\ 0 & -ike^{-ikd} & ike^{ikd} & qe^{-qd} \end{vmatrix}$$

Вот мы и получили трансцендентное уравнение. И k, и q является функциями E:

$$k = \frac{\sqrt{2m(E-U)}}{h}, q = \frac{\sqrt{2m(U-E)}}{h}$$

так что мы получили уравнение на E.

Ещё одна типовая задача, которую также все дают. Вообще в этой методичке мы разбираем три задачи, которые просто такой баян, которые дают все, которые классика, которую надо знать.

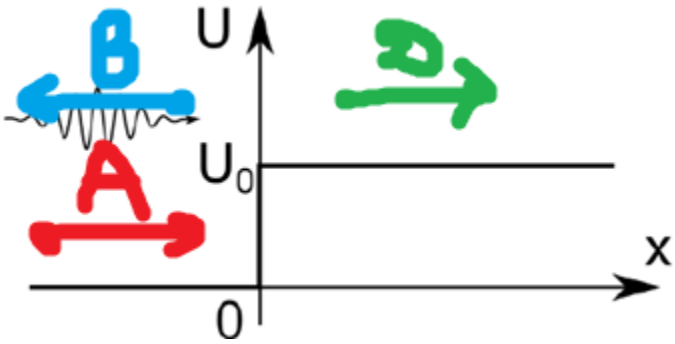


$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ U_0, & x \geq 0 \end{cases}$$

Мы будем считать $E > U_0$:

$$\begin{cases} \Psi(x) = Ae^{-ikx} + Be^{ikx} \\ \Psi(x) = De^{iqx} \end{cases}$$

Минуточку, а куда пропало Ce^{-iqx}? Из физических соображений: частица налетает слева.



Ну а далее по нашему алгоритму: сшиваем в нуле

$$\begin{cases} \psi(-0) = \psi(+0) \\ \psi'(-0) = \psi'(+0) \end{cases}$$

$$\begin{cases} A + B = D \\ ikA - ikB = iqD \end{cases}$$

Решаем:

$$q = \frac{k(A-B)}{D}$$

$$q = \frac{k(A-B)}{A+B}$$

$$B = D - A$$

$$kA - kD + kA = qD$$

$$2kA = (k+q)D$$

$$\frac{D}{A} = \frac{2k}{k+q} \text{ – коэффициент прохождения (по амплитуде)}$$

$$\frac{B}{A} = \frac{D}{A} - 1 = \frac{k-q}{k+q} \text{ – коэффициент отражения (по амплитуде)}$$

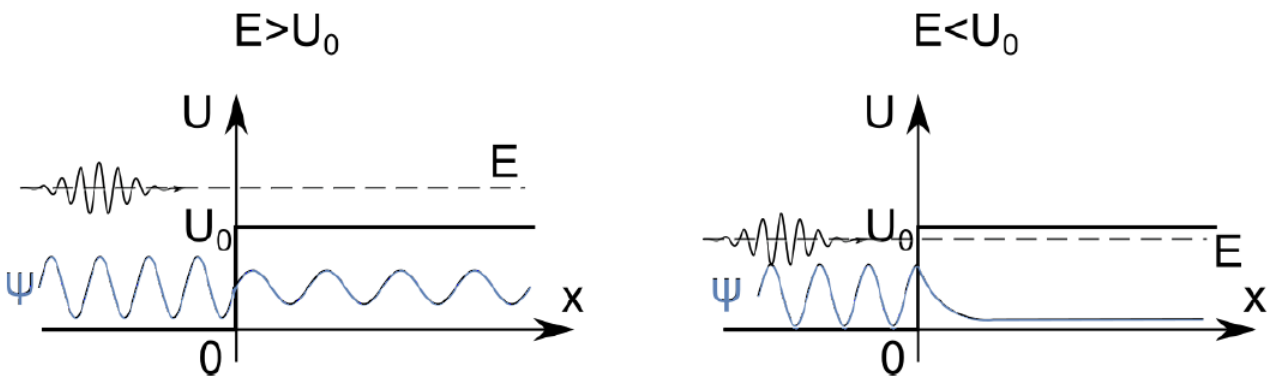
Чтобы получить вероятности отражения частицы от потенциального барьера, нужно взять модули соответствующего амплитудного коэффициента:

$$R(E) = \left|\frac{B}{A}\right|^2 = \frac{(k-q)^2}{(k+q)^2} = \frac{(\sqrt{E} - \sqrt{E-U_0})^2}{(\sqrt{E} + \sqrt{E-U_0})^2}$$

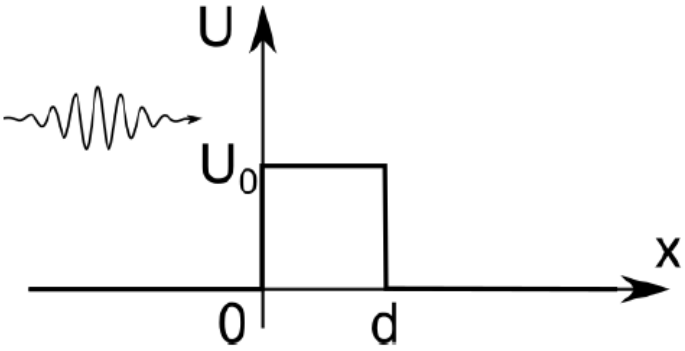
Соответствующая вероятность прохождения находится из условия $R(E)+D(E) = 1$ и отличается от модуля амплитудного коэффициента:

$$D(E) = \left|\frac{D}{A}\right|^2 \frac{q}{k} = \frac{4kq}{(k+q)^2} = \frac{4\sqrt{E(E-U_0)}}{(\sqrt{E} + \sqrt{E-U_0})^2}$$

На рисунке представлен виден ВФ:



Рассмотрим логическое продолжение этой задаче – туннелирование.



$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ U_0, & 0 \le x < d \\ 0, & x \ge d \end{cases}$$

Пишем шаблон для ВФ:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx},\ k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, & x < 0 \\ Ce^{iqx} + De^{-iqx},\ q = \frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar}, & 0 \le x < d \\ Fe^{ikx}\ k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, & x \ge d \end{cases}$$

Производя сшивку ВФ и их производных в точках $x = 0$ и $x = d$, получаем линейную систему алгебраических уравнений на коэффициенты:

$$\begin{cases} A + B = C + D \\ ikA - ikB = iqC - iqD \\ Ce^{iqd} + De^{-iqd} = Fe^{ikd} \\ iqCe^{iqd} - iqDe^{-iqd} = ikFe^{ikd} \end{cases}$$

Полученная система из 4 уравнений имеет 5 неизвестных. Чтобы найти решение, необходимо уменьшить их количество до 4, для этого принято нормировать полученные уравнения на амплитуду ВФ падающей частицы A. Из итоговой системы можно найти коэффициент прохождения:

$$T = \left|\frac{F}{A}\right|^2 = \left(1 + \frac{(k^2 - q^2)}{4k^2}\left|\frac{sin(qd)}{q}\right|^2\right)^{-1} \tag{45}$$

В обратном случае $E < U_0$ (подбарьерный переход) $q - i\zeta$ - мнимое. Тогда вероятность туннелирования, то есть прохождения частицы через барьер:

$$T = \left|\frac{F}{A}\right|^2 = \left(1 + \frac{(k^2 + \zeta^2)}{4k^2}\frac{sh^2(qd)}{q^2}\right)$$

Ярчайший пример туннелирования – теория альфа-распада.
Напомню, что нуклоны удерживает в ядре сильное взаимодействие. Но сильное взаимодействие действует лишь на очень маленьких расстояних, порядка размера атома. Как только α-частица (т.е. ядро гелия с двумя нейтронами) покидает родительский атом, на неё тут же перестаёт действовать сильное взаимодействие,

зато вовсю работает Кулон, который и создаёт потенциальный барьер. Вероятность его преодолеть:

$$p(x)=\exp\left(-\frac{2}{\hbar}\int\sqrt{2m(V(x)-E)}dx\right)$$

Применим её для альфа-распада. Потенциал будет кулоновским, заряд α-частицы 2e, нового ядра (Z-2)e.

$$V(r)=\frac{2(Z-2)e^2}{r}$$

Подставляем. Надо определиться с границами определённого интеграла. На первый взгляд хочется интегрировать от 0 до +бесконечности:

$$\exp\left(-\frac{2}{\hbar}\int_0^{+\infty}\sqrt{2m\left(\frac{2(Z-2)e^2}{r}-E\right)}dr\right)$$

Однако если мы видим, что при некотором $r_{критич}$ подрадикальное выражение становится отрицательным. При $r > r_{критич}$ энергия E частицы становится уже больше кулоновского притяжения, и далее она может свободно двигаться. Т.е. потенциальный барьер заканчивается на $r_{критич}$. Этот критический радиус мы находим из условия

$$\frac{2(Z-2)e^2}{r_{крит}}=E \Rightarrow r_{крит}=\frac{2(Z-2)e^2}{E}$$

Подставляем:

$$\exp\left(-\frac{2}{\hbar}\int_0^{\frac{2(Z-2)e^2}{E}}\sqrt{2m\left(\frac{2(Z-2)e^2}{r}-E\right)}dr\right)$$

Этот интеграл удобно упростить. Обезразмерим переменную интегрирования:

$$\exp\left(-\frac{2}{\hbar}\cdot\frac{2(Z-2)e^2}{E}\int_0^{\frac{2(Z-2)e^2}{E}}\sqrt{2m\left(\frac{2(Z-2)e^2}{r}-E\right)}d\frac{r}{\left(\frac{2(Z-2)e^2}{E}\right)}\right)$$

Перейдём к переменной $\alpha = r/r_{критич} = \frac{r}{\left(\frac{2(Z-2)e^2}{E}\right)}$

Верхний предел тогда сменится на 1. Дальнейшие подсчёты дадут

$$\exp\left(-\frac{2}{\hbar}\frac{2(Z-2)e^2}{E}\int_0^1\sqrt{2m\left(\frac{E}{\alpha}-E\right)}d\alpha\right)=\exp\left(-\frac{2}{\hbar}\frac{2(Z-2)e^2}{E}\sqrt{2mE}\int_0^1\sqrt{\frac{1}{\alpha}-\alpha}\,d\alpha\right)=$$

$$=\exp\left(\frac{-4\sqrt{2}(Z-2)e^2}{\hbar}\sqrt{\frac{m}{E}}\int_0^1\sqrt{\frac{1}{\alpha}-\alpha}\,d\alpha\right)$$

Принципиально тут наличие корня из энергии в знаменателе, потому что всё остальное – константы для данного ядра (страшный интеграл – это просто некий коэффициент).

Пример с туннелированием настолько интересный, что давайте разберём её поподробнее.

Давайте представим, что в ситуации на картинке Крош и Ёжик толкнули и отпустили кровать:

а) чуть-чуть толкнули

б) толкнули сильнее, но недостаточно, чтобы она докатилась до дома Совуньи.

В классике концовка этих ситуаций будет одна и та же: кровать остановится и поедет назад прямо на наших героев.

В квантах же есть вероятность туннелирования. Причём она чем выше, тем меньше «недостача» по энергии:

$$\text{вероятность} \sim \exp\left(-\sqrt{\text{недостача энергии}}\right)$$

Если нам не хватает «чуть-чуть», то и шансфы протуннелировать побольше.

А конкретно для альфа-распада энергия есть и в пределах интегрирования:

$$\exp\left(-\frac{2}{\hbar}\int_0^{\frac{2(Z-2)e^2}{E}}\sqrt{2m\left(\frac{2(Z-2)e^2}{r}-E\right)}dr\right)$$

Можно увидеть, что вдобавок к этому чем меньше энергия, тем больше расстояние, сквозь которое придётся протуннелировать, чем меньше вероятность. Так что когда решите в следующий раз пройти сквозь стену

, выбирайте стены потоньше ☺

Т.е. у нас сразу два фактора, влияющие в одну сторону на зависимость вероятности от энергии. Именно это обеспечивает КРАЙНЕ СИЛЬНУЮ зависимость периода полураспада (который обратно пропорционален вероятности) от энергии:

энергии уносит α-частица). Конкретнее, было установлено правило Гейгера-Нетолла (H.Geiger, J.M.Nutall) – в ряду α-радиоактивных изотопов одного элемента, время жизни ядра связано с выделяемой энергией формулой

$$T \approx e^{-A+B/\sqrt{E}},$$

где A, B – некоторые (зависящие от Z) постоянные. На практике, изменение энергии α-частиц менее, чем вдвое (например, от 4 до 6 МэВ), сопровождается изменением времени жизни ядра на 7 порядков! Причины появления