

ПЪРВИ СЪПКИ В КВАНТОВАТА ФИЗИКА: ЕЛЕМЕНТАРНО ИЗЛОЖЕНИЕ – I МЕТОД

Михаил Аврамов, Димитър Мърваков
Софийски университет „Св. Климент Охридски“

Резюме. В настоящата работа, педагогическа по своя характер, е представен подход за първоначално запознаване с квантовото поведение на микрочастиците в случай на едномерно движение, при което потенциалната им енергия е постоянна, но се променя скокообразно при преминаване от една област в друга. Методът се базира на отчитането на вълновите свойства и изхожда от разбирането, че състоянието на всяка микрочастица се описва с вълнова функция, която е дефинирана за всяко x . Тази функция удовлетворява принципа на суперпозицията и при свободно движение представлява вълна на Дьо Бройл. Физическата постановка на задачата определя и поведението на вълновата функция в класически забранената област – вълната на Дьо Бройл се превръща в затихваща експонента, като използваме явната параметрична зависимост от енергията на частицата. Стандартните изисквания за еднозначност, ограниченост и непрекъснатост на вълновата функция водят до еднозначно описание на физическата ситуация. Много полезна се оказва аналогията с поведението на електромагнитните вълни в оптиката. Като базов пример е взета задачата за движение на частица в поле с форма на потенциално стъпало и е приведено подробно решение.

Ключови думи: квантова физика; просто въведение

Въведение

Квантовата механика е основата на съвременната физика. Тя се формира като пълноценна физична теория в първата половина на XX век. Като правило, се изучава в рамките на университетския курс по физика. Овладяването на квантовата механика в нейната пълнота е съпроводено с две основни трудности. Първата е усвояването на разнообразния и богат математичен апарат, включващ частни диференциални уравнения, функционален анализ, специални функции и т.н. Втората, при това по-съществена, е осъзнаването на парадоксалността в поведението на микрочастиците, от гледна точка на описанието им в рамките на класическата механика, и необходимостта от въвеждането на нови понятия. За да се преодолеят усещането за дискомфорт

при ползването на тези непривични понятия и комплексът за непълноценност, който неизбежно възниква в случая, има само един начин: за да се разбере тяхната същност, с тях трябва да се свикне. За тази цел е полезно да се използват аналогии между явления от различни области на физиката.

Основно свойство на микрочастиците е техният корпускулярно-вълнов дуализъм. Какво се подразбира под това понятие? В класическата физика широко се използват моделите на материална точка и вълна. Поотделно не е трудно да си ги представим. Материалната точка се свързва с частица (корпускула), а вълната – с произволна по природа вълна (вълна върху водна повърхност, звукова вълна, светлинна вълна). Оказва се, че електроните и другите микрочастици (протони, неутрони, атоми, молекули и всички елементарни частици) проявяват не само корпускулярни, но и вълнови свойства, а произволни по природа вълни – корпускулярни свойства. Колкото и да е удивително, квантовата механика успява да обедини в описанието несъчетаемите за класическата механика свойства – корпускулярните и вълновите свойства на един и същ обект, напр. електрона.

Основните особености на квантовата механика се разкриват в опита на Юнг, проведен с електрони. Този опит, блестящо анализиран в лекциите на Ричард Файнман (Feynman et al., 1963), води до следното заключение: електроните винаги попадат върху екрана цели, като частици, но мястото им не е еднозначно определено. Вероятността за попадане на електрон в дадена точка от екрана е разпределена така, както интензивността на вълните в опита на Юнг. В този смисъл, електронът има поведение и като частица, и като вълна. Опитът на Юнг с електрони не може да бъде обяснен, ако се придържаме към схващането, че всеки електрон се движи по определена траектория, т.е. във всеки момент частицата има определено положение и импулс (скорост). Те определят състоянието на частицата в класическата механика. За да може да се обясни опитът на Юнг, трябва да се формулира по нов начин понятието състояние.

В квантовата механика се приема, че състоянието се задава с вълнова функция $\Psi(x,t)$ (в едномерния случай), чрез която се пресмятат вероятностите за реализация на едно или друго положение в даден момент:

$$dP(x,t) = |\Psi(x,t)|^2 dx \quad (1a)$$

е вероятността частицата да се намира в интервала от x до $x + dx$, когато състоянието на частицата е $\Psi(x,t)$. Особено важно е, че тази функция е зададена в цялото пространство! Тя трябва да удовлетворява изисквания за еднозначност, ограниченост и непрекъснатост и да бъде нормирана – напр. чрез равенството

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

или с друго условие, еквивалентно на горното равенство (Landau & Lifshitz, 1972).

За да може да се обясни интерференчната картина в опита на Юнг с електрони, вълновата функция трябва да удовлетворява *принципа на суперпозицията*. Ако $\Psi_1(x, t)$ и $\Psi_2(x, t)$ са две различни състояния на частицата, то възможно състояние е

$$\Psi(x, t) = c_1 \Psi_1(x, t) + c_2 \Psi_2(x, t) \quad (2)$$

с произволни комплексни числа c_1 и c_2 . Квантовомеханичният принцип на суперпозицията на състоянията няма аналог в класическата механика. Налице е фундаментална разлика между състоянията $\Psi_1(x, t)$ и $\Psi_2(x, t)$, от една страна, и състоянието $\Psi(x, t)$, от друга. Нека състоянията 1 и 2 са състояния с определена енергия E_1 и E_2 съответно. Каква енергия има частицата в състояние $\Psi(x, t)$, което е суперпозиция на 1 и 2? Отговорът е, че частицата няма определена енергия в това състояние. Ако се проведе серия от опити за регистрация на енергията на частицата в квантовото състояние $\Psi(x, t)$, с вероятност $P_1 \sim |c_1|^2$ тя ще има енергия E_1 , а с вероятност $P_2 \sim |c_2|^2$ – енергия E_2 . Не е възможно да бъде регистрирана друга стойност на енергията на частицата!

За да стане описаният формализъм действащ, трябва да се посочи начин за определяне на вълновата функция при движение на частицата в силово поле с определена структура. През 1926 г. Ервин Шрьодингер формулира основното уравнение на нерелативистката квантова механика, като просто нейно изложение за първоначално запознаване е дадено в Warner & Cheng (2012).

Нашето изложение е свързано непосредствено с хипотезата на Дьо Бройл (Katlov & Kirichenko, 2004), че вълновата функция на свободно движеща се частица с енергия

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad (3)$$

е плоска вълна на Дьо Бройл

$$\Psi(x, t) = A e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)}, \quad (4)$$

като са в сила съотношенията

$$E = h\nu, \quad p = \frac{h}{\lambda} \quad (5)$$

Тъй като енергията е определена с точност до произволна константа U_0 , съотношението (3) може да бъде заменено с изрази

$$E = \frac{p^2}{2m} + U_0, \quad (6)$$

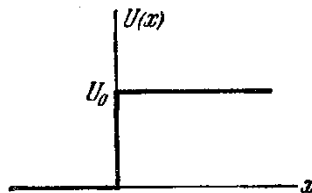
при което в съответната област, където $U_0 \neq 0$, импулсът става $p = \sqrt{2m(E - U_0)}$ и при същата енергия E на частицата дължината на вълната λ се променя.

В настоящата работа е показано как могат да бъдат анализирани чрез описания формализъм основни квантовомеханични задачи при едномерното движение на частица в потенциално поле, включващо няколко участъка с постоянна потенциална енергия, без явно да се използва уравнението на Шрьодингер. По този начин може да се демонстрира „едно от най-прекрасните свойства на квантовата механика – колко много може да се изведе от толкова малко“, както се е изразил Файнман. Читателят ще може да се убеди колко много ефекти могат да бъдат обяснени на базата на въведените по-горе принципи, като изложението предполага само елементарни знания по диференциално и интегрално смятане, както и знания от алгебрата на комплексните числа.

Основна задача

За да изясним каква промяна настъпва с вълновата функция, когато се наблюдава скок на потенциалната енергия, ще разгледаме неограничено едномерно движение на частица с енергия E в поле с потенциална енергия

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0; \\ U_0, & x \geq 0. \end{cases} \quad (7)$$



Фигура 1 $U(x)$

Възможни са два случая (фиг. 1) – с $E > U_0$ и с $E < U_0$ (Karlov & Kirichenko, 2004). В първия случай ($E > U_0$) в областта I ($x < 0$) импулсът и дължината на вълната на Дьо Бройл на частицата са съответно

$$p = \sqrt{2mE}, \quad \lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE}}, \quad (8a)$$

а в областта II ($x > 0$) –

$$p' = \sqrt{2m(E - U_0)}, \quad \lambda' = \frac{h}{p'} = \frac{h}{\sqrt{2m(E - U_0)}}. \quad (8b)$$

Между λ и λ' съществува връзката

$$\lambda' = \frac{\sqrt{2mE}}{\sqrt{2m(E - U_0)}} \times \frac{h}{\sqrt{2mE}} = \sqrt{\frac{E}{E - U_0}} \lambda = \frac{\lambda}{n}.$$

По аналогия с оптиката областите I и II могат да се интерпретират като еднородни среди с относителен показател на пречупване

$$= \frac{1}{n} = \sqrt{1 - \frac{U_0}{E}} < 1.$$

Тогава разпространяващата се в посока x вълна на Дьо Бройл

$$\psi_0(x, t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)} = \psi_0(x)e^{\frac{-i}{\hbar}Et}, \quad (9a)$$

когато достигне границата между двете области, може да се отрази (включително и пълно вътрешно отражение) и да премине. По този начин в областта I се формира отразена вълна

$$\psi_T(x, t) = Ce^{\frac{i}{\hbar}(p'x - Et)} = \psi_T(x)e^{\frac{-i}{\hbar}Et}, \quad (9b)$$

а в областта II – преминала вълна

$$\psi_T(x, t) = Ce^{\frac{i}{\hbar}(p'x - Et)} = \psi_T(x)e^{\frac{-i}{\hbar}Et}. \quad (9c)$$

Когато източник изстрелва постоянно частици в посока x , може да се реализира стационарна ситуация. В областта I ще имаме наслагване на падаща вълна и отразена вълна, т.е.

$$\psi_I(x, t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)} + Be^{-\frac{i}{\hbar}(px+Et)} = \left(Ae^{\frac{i}{\hbar}px} + Be^{-\frac{i}{\hbar}px} \right) e^{-\frac{i}{\hbar}Et}, \quad (10a)$$

а в областта II – само преминала вълна

$$\psi_{II}(x, t) = Ce^{\frac{i}{\hbar}(p'x-Et)} = Ce^{\frac{i}{\hbar}p'x} e^{-\frac{i}{\hbar}Et}. \quad (10b)$$

Във втория случай ($E < U_0$) за областта I ситуацията не се променя. В областта II обаче имаме

$$p' = \sqrt{2m(E - U_0)} = \sqrt{-2m(U_0 - E)} = i\sqrt{2m(U_0 - E)} = iq, \quad (11)$$

при което преминалата вълна се трансформира в затихваща, т.е. в сила е съответствието

$$\psi_{II}(x, t) = Ce^{\frac{i}{\hbar}(p'x-Et)} \rightarrow \psi_{II}(x, t) = Ce^{-\frac{1}{\hbar}qx} e^{-\frac{i}{\hbar}Et}. \quad (12)$$

Полученият резултат може да бъде обобщен за случай на движение в обратна посока на оста x в поле с потенциална енергия

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

В областта $x > 0$ при всяка енергия има падаща и отразена вълна

$$\psi_I(x, t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(-px-Et)} + Be^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)} = \left(Ae^{-\frac{i}{\hbar}px} + Be^{\frac{i}{\hbar}px} \right) e^{-\frac{i}{\hbar}Et}.$$

При $x < 0$, когато $E > U_0$, има само преминала вълна

$$\psi_{II}(x, t) = Ce^{\frac{i}{\hbar}(-p'x-Et)} = Ce^{-\frac{i}{\hbar}p'x} e^{-\frac{i}{\hbar}Et},$$

която преминава в затихваща, когато $E < U_0$, т.е.

$$\psi_{II}(x, t) = Ce^{-\frac{1}{\hbar}qx} e^{-\frac{i}{\hbar}Et}.$$

Следователно за двата случая на разпространение на вълна на Дьо Бройл ($E > U_0$) можем да запишем общо условие за съответствие при $E < U_0$:

$$\psi_{II}(x, t) = Ce^{\frac{i}{\hbar}(\pm p'x-Et)} \rightarrow \psi_{II}(x, t) = Ce^{-\frac{1}{\hbar}q|x|} e^{-\frac{i}{\hbar}Et}. \quad (13)$$

Този резултат е много важен. Въпреки областта II да е класически недостъпна за частицата, в квантовия случай съществува отлична от нула вероятност частицата да се намира в тази област при $E < U_0$, като вероятността намалява експоненциално с навлизането – в класически забранената област. Освен това, ако частицата се приближава към потенциална стена с височина $U_0 \rightarrow \infty$, функцията $\psi_{II}(x, t) \rightarrow 0$, т.е. в област, където потенциалната енергия е безкрайно голяма, вълновата функция е равна на нула. Вероятността частицата да попадне на това място, е нула!

В заключение можем да дефинираме следните правила при задаване на вълновата функция за $E < U_0$, когато потенциалната енергия търпи скок при $x = 0$:

$$\psi_I(x, t) = \left(A e^{\frac{i}{\hbar} p x} + B e^{-\frac{i}{\hbar} p x} \right) e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \quad \rightarrow \quad \psi_{II}(x, t) = C e^{-\frac{1}{\hbar} q |x|} e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \quad (14)$$

класически разрешена област
класически забранена област

Вълновата функция на частицата трябва да бъде еднозначна, непрекъсната и ограничена за всяко x . В разглеждания случай еднозначността и непрекъснатостта на функцията

$$\psi(x, t) = \begin{cases} \psi_I(x, t) & x < 0 \\ \psi_{II}(x, t) & x > 0 \end{cases} \quad (15)$$

не са осигурени при $x = 0$. Затова налагаме следните условия

$$\psi_I(0, t) = \psi_{II}(0, t) \quad (\text{непрекъснатост}), \quad (16a)$$

$$\psi'_I(0, t) = \psi'_{II}(0, t) \quad (\text{гладък преход}). \quad (16b)$$

Основен пример

Нека разгледаме подробно двата възможни случая.

1. $E > U_0$. Условията при $x = 0$ дават следните връзки между коефициентите:

$$\begin{aligned} A + B &= C, & p(A - B) &= p' C, \\ B &= \frac{p - p'}{p + p'} A, & C &= \frac{2p}{p + p'} A. \end{aligned}$$

Тогава вълновата функция на частицата има вида

$$\psi_I(x, t) = A \left(e^{\frac{i}{\hbar} p x} + \frac{p - p'}{p + p'} e^{\frac{i}{\hbar} p' x} \right) e^{\frac{i}{\hbar} E t}$$

$$\psi_{II}(x, t) = A \frac{p}{p'} e^{\frac{i}{\hbar} p' x} e^{\frac{i}{\hbar} E t}$$

Тази функция е определена при всички възможни стойности на p и p' , т.е. при всяка стойност на енергията E на частицата. Ето защо частицата има непрекъснат енергетичен спектър. Константата A може да бъде определена чрез налагане на допълнително условие, например условие за нормировка. Ако използваме аналогията с флуид с плътност ρ и скорост v , чиято плътност на масовия поток е $j = v\rho$, можем да използваме съответствията

$$\rho \rightarrow |\psi|^2, \quad v \rightarrow \frac{p}{m} \text{ или } \frac{p'}{m}.$$

Плътността на потока на вероятността в падащата вълна е

$$j_0 = \frac{p}{m} |\psi_0|^2 = \frac{p}{m} |A|^2, \quad (17)$$

като той може да бъде нормиран на скоростта на частицата, ако изберем $|A| = 1$. Тогава можем да въведем следните две величини:

$$\text{коефициент на отражение } R = \left| \frac{j_R}{j_0} \right| = \left| \frac{B}{A} \right|^2 = \frac{(p - p')^2}{(p + p')^2} = \left(\frac{1 - \sqrt{1 - U_0/E}}{1 + \sqrt{1 - U_0/E}} \right)^2, \quad (18a)$$

$$\text{коефициент на преминаване } T = \left| \frac{j_T}{j_0} \right| = \frac{p'}{p} \left| \frac{C}{A} \right|^2 = \frac{4pp'}{(p + p')^2} = 4 \frac{\sqrt{1 - U_0/E}}{(1 + \sqrt{1 - U_0/E})^2}, \quad (18b)$$

които определят съответно вероятността R за отразяване от потенциалното стъпало и вероятността T за преминаване над потенциалното стъпало. Както се вижда, изпълнено е условието

$$R + T = 1, \quad (19)$$

като едновременно $0 < R < 1$, $0 < T < 1$. Налице е разлика от класическото поведение, при което се наблюдава само преминаване над бариерата с намалена скорост. В квантовия случай се наблюдава и надбариерно отражение, свързано с вълновите свойства на частиците.

2. $E < U_0$. Както следва от (13) и (14), в този случай се променя характерът на вълновата функция в областта $x > 0$ – от осцилираща тя става затихваща.

Това е свързано с промяната на импулса $p' \rightarrow iq$. Условието, които трябва да удовлетвори вълновата функция при $x = 0$, се получават от тези за $E > U_0$, като се използва замяната $p' \rightarrow iq$. Тогава при всяка енергия $E < U_0$ имаме следните изрази за коефициентите

$$B = \frac{p-iq}{p+iq} A, \quad C = \frac{2p}{p+iq} A,$$

при което вълновата функция на частицата има вида

$$\psi_I(x,t) = A \left(e^{\frac{i}{\hbar} p x} + \frac{p-iq}{p+iq} e^{-\frac{i}{\hbar} p x} \right) e^{-\frac{i}{\hbar} E t}, \quad (20a)$$

$$\psi_{II}(x,t) = A \frac{2p}{p+iq} e^{-\frac{1}{\hbar} q x} e^{-\frac{i}{\hbar} E t}. \quad (20b)$$

Според определението коефициентът на отражение е

$$R = \left| \frac{j_R}{j_0} \right| = \left| \frac{B}{A} \right|^2 = \left| \frac{p-iq}{p+iq} \right|^2 = 1.$$

Това означава, че коефициентът на преминаване е $T = 0$. В класическия случай се наблюдава подобно поведение – частицата се отразява с вероятност 1 от стъпалото при $E < U_0$, тъй като частицата не може да проникне в областта $x > 0$, където кинетичната ѝ енергия трябва да бъде отрицателна. Според квантовата физика частицата може да се намира при $x > 0$ с отлична от нула плътност на вероятност

$$w_{II}(x) = |\psi_{II}(x,t)|^2 = \frac{4p^2}{p^2+q^2} e^{-\frac{2}{\hbar} q x} = \frac{4p^2}{p^2+q^2} \exp \left[-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U_0-E)} x \right]. \quad (21)$$

В този израз определящ е експоненциалният множител, който зависи от три величини – масата на частицата m , енергетичната разлика $U_0 - E$ и

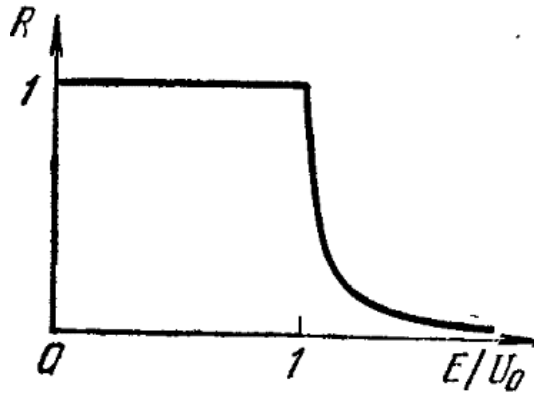
разстоянието от границата на стъпалото. За числена оценка на експоненциалния множител в случай на електрон ($m = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$) ще използваме $U_0 - E = 1 \text{ eV}$. При $x = 10^{-10} \text{ m}$, сравнимо с размерите на атома, имаме

$$\exp\left[-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - E)x}\right] \approx 0,29, \quad (22a)$$

т.е. вероятността за проникване в класически забранената област в дадения случай е достатъчно голяма. За сравнение, когато $x = 10^{-9} \text{ m}$, получаваме

$$\exp\left[-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - E)x}\right] \approx 4,5 \cdot 10^{-8}, \quad (22b)$$

т.е. вероятността вече е пренебрежимо малка. Направените оценки показват, че в разгледания случай електронът със забележима вероятност може да проникне в областта II само на разстояния, сравними с атомните размери. Графически ходът на коефициента на отразяване R от потенциалното стъпало в зависимост от енергията E на частицата е показан на фиг. 2. Пълно отражение се наблюдава само при $0 < E < U_0$.



Фигура 2. Зависимост на коефициента на отразяване от енергията на частицата

Интересно е да се направи връзка с аналогично явление в класическата физика – явлението пълно вътрешно отражение във вълновата оптика. То се наблюдава, когато светлината достигне разделителната граница

между оптично по-плътна и оптично по-малко плътна среда, т.е. когато относителният показател на пречупване $n = n_2 / n_1 < 1$, и е възможно само когато ъгълът на падане е по-голям от граничния ъгъл. Светлината прониква в оптично по-малко плътната среда, като амплитудата ѝ намалява експоненциално с дълбочината на проникване. В оптиката преминаването от режим на отражение и пречупване на светлината към режим на пълно вътрешно отражение се определя от стойностите на ъгъла на падане, докато в квантовата механика (едномерен случай) ролята на параметър, определящ преминаването от режим на отражение и преминаване на частицата през бариерата към режим само на отражение, е енергията ѝ.

Заклучение

В работата се използва метод, който отчита вълновите свойства на частиците, и е показано как от вида на вълната на Дьо Бройл може да се конструира вълновата функция в случай на едномерно движение, като потенциалната енергия е постоянна в дадена област, но се променя скокообразно при преминаване от една област в друга. Разгледаният подробно базов пример на движение на частица в поле с форма на потенциално стъпало дава възможност да се анализират трите типа състояния на една микрочастица – с дискретни енергии, с непрекъснато изменяща се енергия и така наречените квазистационарни състояния. Това ще бъде направено във втората част на работата, която се подготвя за печат.

ЛИТЕРАТУРА

- Карлов, Н.В. & Кириченко, Н.А. (2004). *Начальные главы квантовой механики*. Москва: ФИЗМАТЛИТ.
- Ландау, Л.Д. & Лифшиц, Е.М. (1972). *Краткий курс теоретической физики, кн. 2 – Квантовая механика*. Москва: Наука.

REFERENCES

- Feynman, R., Leighton, R. & Sands, M. (1963). *The Feynman lectures on physics, volume 1, chapter 37*. Boston: Addison-Wesley.
- Karlov, N.V. & Kirichenko, N.A. (2004). *Nachalnie glavi kvantovoj mekhaniki*. Moskwa: FIZMATLIT.
- Landau, L.D. & Lifshitz, E.M. (1972). *Kratkij kurs teoreticheskoy fiziki, kniga 2*. Moskwa: Nauka.
- Warner, M. & Cheung, A.C.H. (2012). *A Cavendish quantum mechanics primer*. Oxford: Oxford University Press.

FIRST STEPS IN QUANTUM PHYSICS: BASICS – 1. METHOD

Abstract. The work uses a method that takes into account the wave properties of particles and shows how de Broglie's wave can be used to construct a wave function in the case of one-dimensional motion, with the potential energy being constant in a given region, but changing abruptly when passing from one area to another.

Keywords: quantum physics; simple introduction

✉ **Dr. Mihail Avramov**

Department of Physical Chemistry

University of Sofia

1, James Bourchier Blvd.

1164 Sofia, Bulgaria

E-mail: mavramov@chem.uni-sofia.bg

✉ **Dr. Dimitar Marvakov**

Faculty of Physics

University of Sofia

5, James Bourchier Blvd.

1164 Sofia, Bulgaria

E-mail: marvakov@phys.uni-sofia.bg