10-ДӘРІС

Асқарұлы Қыдыр
PhD., қауымдастырылған профессор

Шредингердің жалпы және стационар теңдеулері. Бір өлшемді потенциалдық шұңқырдағы бөлшек. Бөлшектің потенциалдық тосқауыл арқылы өтуі (Туннелдік эффект)

Кванттық механикадағы бөлшектің күйін, координат пен уақытқа тәуелді Ψ(x,y,z,t) толқындық функцияның берілуі бойынша анықталатындығын өткен дәрістерде біз түсіндірген болатынбыз. Сондықтан, кванттық механикадағы толқындық функцияның түрін іздеу үшін, классикалық механикадағы Ньютонның қозғалыс теңдеуі сияқты теңдеуді алу керек. Мұндай теңдеуді 1926 жылы Э.Шредингер тапты. Шредингер теңдеуі қорытылмайды, ол белгілі тәжірибелік фактілер негізінде постулаттандырылады және оның растығы теориялық есептер мен тәжірибелік мәліметтердің сәйкес келуімен дәлелденеді.

Жалпы жағдайда Шредингер теңдеуінің түрі

$$-\frac{\hbar}{i}\cdot\frac{d\Psi}{dt}=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi+U(x,y,z,t)\cdot\Psi\,, \qquad (11.1)$$

мұндағы m – бөлшектің массасы, $\hbar = h/2\pi = 1{,}05\cdot 10^{-34}$ Дж·с – 2π-ге бөлінген Планк тұрақтысы, $i=\sqrt{-1}$ – жорамал сан, Ψ(x,y,z,t) – толқындық функция, U(x,y,z,t) – күштік өрістегі бөлшектің потенциялдық энергиясы, $\Delta=\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}$ – Лаплас операторы.

(11.1) теңдеуі v<<c жылдамдықпен (c – вакуумдағы жарық жылдамдығы) қозғалатын кез-келген микробөлшек үшін орынды. Шредингер теңдеуі Ψ(x,y,z,t) толқындық функциясына қосымша шарттар қояды:

1. Ψ (x,y,z,t) толқындық функциясы шекті, үздіксіз және бірмәнді болуы қажет;
2. Ψ(x,y,z,t) толқындық функциясы $\frac{\partial\Psi}{\partial x},\frac{\partial\Psi}{\partial y},\frac{\partial\Psi}{\partial z},\frac{\partial\Psi}{\partial t}$ үздіксіз дербес туындыларға ие болуы керек;
3. Ψ(x,y,z,t) функциясы интегралдануы керек, яғни $\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}|\Psi|^2\,dxdydz$ интегралы шекті болуы қажет.

(11.1) Шредингер теңдеуі жалпы жағдай үшін шешілмейді. Бірақ, бұл теңдеудегі потенциялық энергия уақытқа тәуелсіз, яғни бөлшек қозғалатын күштік өріс стационарлы болатын есептер үшін қысқартуға болады. Бұл жағдайда Ψ(x,y,z,t) толқындық функцияны екі толқындық функцияның көбейтіндісі ретінде жіктейміз: ψ(x,y,z) – тек координатқа тәуелді және φ(t) – тек уақытқа тәуелді:

$$\Psi(x,y,z,t)=\psi(x,y,z)\cdot\varphi(t)\,. \qquad (11.2)$$

(11.2) өрнегін (11.1) Шредингер теңдеуіне қойып, мынаны аламыз

$$-\frac{\hbar}{i}\psi\cdot\frac{d\varphi}{dt}=-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi\Delta\psi+U(x,y,z)\psi\cdot\varphi\,.$$

Соңғы теңдеудің оң және сол жағын ψ·φ көбейтіндісіне бөлеміз:

$$\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{1}{\psi}\cdot\Delta\psi-U(x,y,z)=\frac{\hbar}{i}\cdot\frac{1}{\varphi}\cdot\frac{d\varphi}{dt}\,. \qquad (11.3)$$

Теңдеудің сол жақ бөлігі тек координатқа, ал оң жақ бөлігі тек уақытқа тәуелді болғандықтан, бұл теңдіктің әр жағы жеке-жеке тұрақты бір шамаға тең болған жағдайда ғана орындалады. Ол тұрақты шама энергияның өлшемін иемденуі керек және U(x,y,z) потенциялық энергиясы бар күштік өрістегі қозғалатын бөлшектің толық энергиясы болуы керек , яғни -Е .

екі теңдеу аламыз: біріншісі тек уақытқа тәуелді

$$\frac{\hbar}{i}\cdot\frac{1}{\varphi}\cdot\frac{d\varphi}{dt}=-E\,, \qquad (11.4)$$

екіншісі тек координатқа тәуелді (Шредингердің стационарлы теңдеуі)

$$\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{1}{\psi}\Delta\psi-U(x,y,z)=-E\,,$$

мұны келесі түрде жазуға болады:

$$\Delta\psi+\frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\psi=0\,. \qquad (11.5)$$

Шрёдингердің стационарлық теңдеуі (11.5) кез-келген U(x,y,z) үшін шешіле бермейді, бірақ кейбір дербес жағдайларда бұл теңдеудің шешімін табуға болады. Берілген U(x,y,z) үшін Шредингер теңдеуін қанағаттандыратын толқындық функциялар меншікті функциялар деп, ал осы кездегі Шредингер теңдеуінің шешімі табылатын Е-нің мәндері энергияның меншікті мәндері деп аталады. Айнымалы шамаларды бөле отырып (11.4) теңдеуін интегралдауға болады

$$\frac{d\varphi}{\varphi}=-\frac{i}{\hbar}E\cdot dt \quad\Rightarrow\quad \ell n\varphi=-\frac{i}{\hbar}Et+\ell n\varphi_0\,.$$

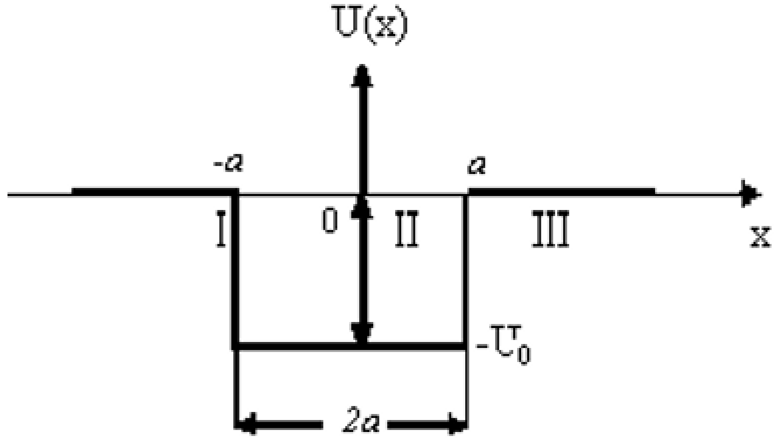
Соңғы теңдеуден (11.4) теңдеуді қанағаттандыратын толқындық функцияны аламыз

$$\varphi=\varphi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}Et}, \qquad (11.6)$$

мұндағы φ_0 – φ функциясының амплитудалық мәні.

Бір өлшемді потенциалдық шұңқырдағы электронның қозғалысы туралы есепті қарастырып көрейік. Потенциалдық шұңқыр деп 11.1-суретте көрсетілгендей түрі бар, U(x)-тың x-қа тәуелділігін айтады.

Мұндай қозғалыстың, мысалы ретінде металл ішіндегі электрондардың қозғалысын қарастыруға болады. Бұл жағдайда металл сыртындағы электрон ның потенциалдық энергиясы нөлге тең. (11.1-суреттегі I және III аймақтар – шұңқыр сырты $|x|>a$, $U=0$), ал металл ішіндегі потенциялы теріс мәнге ие және электронның металдан шығу жұмысына тең (11.1 суреттегі II аймақ, шұңқыр іші, $|x|<a$, $U=-U_0$).



11.1-сурет. Бірөлшемді потенциалдық шұңқыр.

Потенциалдық шұңқырдың ені 2а. Электрон қозғалысы бір өлшемді болғандықтан (OX осі бойымен), толқындық функция тек x осіне тәуелді болады және Лаплас операторының түрі $\Delta = \frac{d^2}{dx^2}$. E<0 екенін ескеріп, Шредингер теңдеуін I, III аймақтар және II аймақ үшін мына түрде жазамыз:

$$\text{I және III :} \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \ , \qquad (11.7)$$

$$\text{II:} \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2\psi}{dx^2} = (E - U_0)\psi \ . \qquad (11.8)$$

(11.7) теңдеуін келесі түрде жазайық

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}|E|\psi = 0 \quad \text{және} \quad \frac{2m}{\hbar^2}|E| = \chi^2 > 0 \qquad (11.9)$$

деп белгілейік. Олай болса I және III аймақтар үшін Шредингер теңдеуі мына түрге келеді

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \chi^2\psi = 0 . \qquad (11.10)$$

Бұл теңдеудің шешуі келесі түрдегі толқындық функция болып табылады:

$$\psi(x) = Ae^{\chi x} + Be^{-\chi x}, |x| > a . \qquad (11.11)$$

ψ(x) функциясы шекті функция, олай болса x=±∞ мәндерінде ψ(x) шекті болуы үшін A=B=0 болуы керек, яғни I- және III- аймақтар үшін ψ(x)=0. Олай болса $|\psi|^2=0$, ал мұның мағынасы I- және III- аймақтардағы электронды байқау ықтималдығы нөлге тең екенін білдіреді.

Енді потенциалдық шұңқыр ішіндегі (II аймақ) электрон қозғалысын қарастырайық. Ол үшін (11.8) теңдеуін мына түрде жазайық

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(|E|-U_0)\psi=0, \quad |x|<a \ , \tag{11.12}$$

мұндағы

$$k^2=\frac{2m}{\hbar^2}(|E|-U_0). \tag{11.13}$$

II аймақ үшін Шредингер теңдеуін аламыз, |x|<a

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+k^2\psi=0. \tag{11.14}$$

Бұл (11.14) теңдеуінің шешімі келесі түрдегі толқындық функция болады

$$\psi(x)=C\cos kx+D\sin kx \ , \tag{11.15}$$

мұндағы C және D – шекаралық шарттардан анықталатын тұрақты коэффициенттер. Толқындық функция үздіксіз болу керек, сондықтан I және II аймақтар шекарасы үшін $\psi_{I}(-a)=\psi_{II}(-a)$ шарты орындалуы керек, ал II және III аймақтар шекарасы үшін $\psi_{II}(a)=\psi_{III}(a)$ шарты орындалуы керек. Толқындық функцияның үздіксіз шарттарынан потенциалдық шұңқырдың шекарасында келесі шарттар шығады

$$\begin{aligned} C\cos ka-D\sin ka=0 \\ C\cos ka+D\sin ka=0 \end{aligned}. \tag{11.16}$$

Алынған (11.16) теңдеулерін мүшелеп қосып *coska*=0 аламыз, ал бұл $k_n \grave{a} = \left(n + \frac{1}{2} \right) \pi$ кезінде орындалады, мұндағы n=0,1,2,… Толқындық сан $k_n = 2\pi / \lambda_n$ деп есептеп, мына теңдеуді аламыз:

$$\lambda_n = \frac{2a}{n + \frac{1}{2}}. \qquad (11.17)$$

Бұл, потенциалдық шұңқырдың еніне де-Бройлдың жарты толқын ұзындығының тақ саны келетіндігін көрсетеді. Табылған k_n мәнін (11.13)-ке қойып, мынаны аламыз;

$$|E| = U_0 + \frac{\hbar^2 (n + \frac{1}{2})^2 \pi^2}{2ma^2}. \qquad (11.18)$$

Соңғы өрнек, потенциалдық шұңқырдағы электрон n бүтін санына байланысты энергияның дискретті мәндерін қабылдауы мүмкін деген қортындыға келтіреді және энергияның кез-келген мәндеріне ие болуы мүмкін емес. Басқаша айтқанда, потенциалдық шұңқырдағы электрон, классикалық физикадағы көз-қарастан бөлек, дискретті энергетикалық күйлерде болады.

(11.16) теңдеуді мүшелеп алып, *sinka*=0, яғни $k_n a = n\pi$ аламыз. Соңғы өрнектен

$$\lambda_n = \frac{2a}{n}. \qquad (11.19)$$

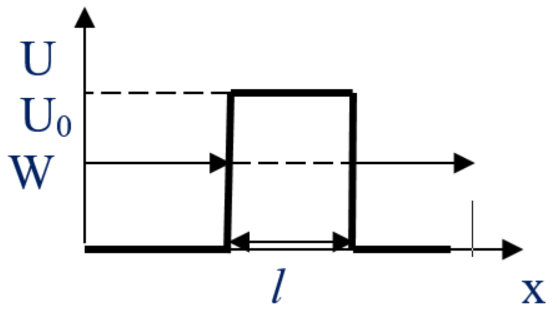
Бұл өрнектен, потенциалдық шұңқырдың еніне толқын ұзындығының бүтін саны дәл келетіндігін көрсетеді. (11.13) теңдеуін ескеріп, потенциалдық шұңқырдағы электрон энергиясы үшін мынаны табамыз:

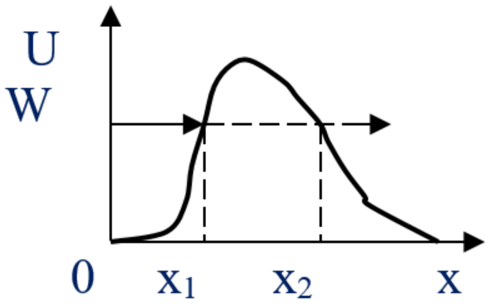
$$|E| = U_0 + \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2}$$

Бұл жағдайда да (11.18) сияқты энергия дискретті мәндерді қабылдайды. Алынған Шредингер теңдеуінің шешімі арқылы потенциалдық шұңқырдағы электрон үшін мынадай қортынды шығаруға болады: потенциалдық шұңқырдағы электронның энергиясы мен де-Бройль толқын ұзындығы кез-келген мәндерді қабылдамайды, олар тек қатаң түрде дискретті мәндерді қабылдайды.

Берілген есепті қарастыру кезінде потенциалдық шұңқырдың шекарасында толқындық функция нолге тең болады деп есептедік. Шын мәнінде, потенциалдық шұңқыр шекарасындағы электронның де-Бройль толқыны өзін әртүрлі сыну көрсеткіштері бар екі ортаның шекарасындағы электромагниттік толқындар сияқты сезінеді. Электромагниттік толқындар екінші ортаға өту шекарасында біршама шағылатындығы және сынатындығы белгілі. Потенциалдық шұңқыр шекарасындағы де-Бройль толқыны да өзін сол сияқты сезінеді, яғни потенциалдық шұңқыр шекарасының сыртында электронды байқаудың белгілі ықтималдығы болады.

Бөлшектің потенциалдық тосқауыл арқылы өтуін қарастырайық. Кванттық механика бөлшектердің потенциалдық тосқауыл (кедергілер) арқылы өтуін қарастырғанда тіпті жаңа қортындыларға келді. 11.2 және 11.3-суреттерде көрсетілгендей, электронның потенциалдық энергиясының тәуелділігін *потенциалдық тосқауыл* деп атайды. Мұндай потенциалдық өрістегі электрон қозғалысын сипаттау үшін, потенциалдық тосқауылдың мөлдірлігі (мөлдірлік коэффициент) D деген ұғым енгізіледі, өйткені энергиясы потенциалдық тосқауылдың биіктігінен кем кейбір электрондардың потенциалдық тосқауыл арқылы өту ықтималдығы бар. Кванттық механикада потенциалдық тосқауылдың мөлдірлігі деп потенциалдық тосқауыл арқылы де-Бройль толқынының өту ықтималдығы қарастырылады.





11.2-11.3 сурет. Электронның потенциалдық тосқауылдардан өтудегі энергиясының U координатқа x тәуелділігі.

Де-Бройль толқынының потенциалдық тосқауылдан шағылу коэффициенті R (немесе жұту коэффициенті), $R=1-D$ шағылу ықтималдығымен сипатталады. Потенциалдық тосқауылдың мөлдірлігі оның пішіні мен биіктігіне байланысты. Бір өлшемді потенциалдық тосқауыл арқылы өтетін электронның қозғалысы үшін Шредингер теңдеуін шешу жолдарын қарастырмай-ақ, оның қортындыларына тоқталайық.

Биіктігі U_0, ені l болатын тікбұрышты потенциалдық тосқауылдың жағдайында мөлдірлік коэффициенті

$$D = D_0 e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U_0-E)}\cdot\ell}, \tag{11.21}$$

мұндағы m – электрон массасы, E – электрон энергиясы.

Тосқауылдың кез-келген түрі (пішіні) үшін мөлдірлік коэффициентінің өрнегін мына формуламен есептеуге болады:

$$D = D_0 e^{-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2m\left[U(x)-E\right]}\cdot dx}, \tag{11.22}$$

мұндағы x_1 және x_2 – потенциалдық тосқауылдың бастапқы және соңғы координаттары, D_0 – бірге жақын келетін тұрақты коэффициент.

Классикалық механика көзқарасы тұрғысынан бөлшектің толық энергиясы Е потенциалдық тосқауылдың биіктігінен кем болған жағдайда бөлшек тосқауылдың екінші бетіне өте алмайды, яғни D=0. Ал, Шредингер теңдеуінен шығатын қорытындыға байланысты бөлшектің толық энергиясы Е потенциалдық тосқауылдың биіктігінен (потенциалдық энергиясынан) кем болған жағдайдың өзінде, бөлшек тосқауылдың екінші бетіне өту ықтималдығына ие. Мұндай жағдайды, яғни бөлшектердің потенциалдық тосқауылдан өту құбылысы *туннелдік эффект* деп аталады. Тосқауылдың мөлдірлік коэффициенті аса аз болмаған жағдайлар үшін туннелдік эффектінің алатын орны зор. Бұл, әсіресе потенциалдық тосқауылдың өлшемі атом өлшеміне сәйкес келгенде іске асады.

Бөлшектердің потенциалдық тосқауылдан тікелей өтуі радиактивті α-ыдырауы құбылысында және суық эмиссия құбылысында өзінің тәжірибелік дәлелдемелерін тапты.

Бақылау сұрақтары:

1. Кванттық санның үлкен мәндерінде түбі жазық, қабырғалары шексіз биік потенциалдық шұңқыр ішіндегі электронның энергиялық деңгейлері квазиүздіксіз болатындығын көрсетіңіз.

2. Қандай құбылыс туннелдік эффект деп аталады?

Назарларыңызға рахмет!