ШРЕДИНГЕР ТЕНГЛАМАСИ, КВАНТ ҲОЛАТЛАРИ ВА ЭНЕРГИЯЛАРИ, ТЎСИҚНИ ТУННЕЛ ҚИЛИШ



Савурова Шахризода Абдумалик қизи
Нанотехнологияларларни ривожлантириш марказининг таянч докторанти (PhD)
Муқимов Комил Муқимович
Нанотехнологияларларни ривожлантириш маркази директори, академик

Аннотация

Технология товар ва хизматларни иқтисодий (фойдали) ишлаб чиқаришда илмий билимларни қўллаш билан боғлиқ. Ушбу мақолада технологиянинг турли шаклларида ишлайдиган машиналар ва қурилмаларнинг ўлчамлари ёки миқёси билан боғлиқ. Бу, айниқса, мумкин бўлган энг кичик қурилмалар ва нанометрли физиканинг тегишли қонунлари билан боғлиқ: ушбу кўринмас миқёсда материянинг ҳаракатини аниқ башорат қилиш учун мавжуд бўлган "нанофизика". Нанометр шкаласидаги жисмоний хатти-ҳаракатлар Шредингер тенгламаси билан ифодаланган квант механикаси томонидан аниқ башорат қилинади. Шредингер тенгламаси атомларнинг тузилиши ва хоссаларини миқдорий тушуниш имконини беради. Кимёвий моддалар, молекулалар ва ҳатто атомлардан ташкил топган биология ҳужайралари ҳам, принципиал жиҳатдан, нанофизиканинг яхши синовдан ўтган формуласи орқали аниқ тасвирланган (етарлича ҳисоблаш қуввати берилган).

Калит сўзлар: Шредингер тенгламалари, нанофизика, потенциал энергия, Максвелл тўлқин.

Аннотация

Технология связана с применением научных знаний в экономичном (полезном) производстве товаров и услуг. В этой статье речь идет о размере или масштабе машин и устройств, используемых в различных технологиях. Это особенно верно в отношении наименьших возможных устройств и соответствующих законов нанофизики: «нанофизики», которая существует для того, чтобы точно предсказывать поведение материи в этом невидимом масштабе. Физическое поведение на нанометровом уровне точно предсказывается квантовой механикой, выраженной уравнением Шрёдингера. Уравнение Шредингера дает количественное понимание структуры и свойств атомов. Клетки биологии, состоящие из химических веществ, молекул и даже атомов, в принципе могут быть точно описаны (при наличии достаточных вычислительных мощностей) с помощью хорошо проверенных формулировок нанофизики.

Ключевые слова: Уравнения Шрёдингера, нанофизика, потенциальная энергия, волна Максвелла.

Annotation

Technology is related to the application of scientific knowledge in the economic (useful) production of goods and services. This article deals with the size or scale of machines and devices used in various forms of technology. This is especially true of the smallest possible devices and the corresponding laws of nanometer physics: "nanophysics" that exists to accurately predict the behavior of matter at this invisible scale. Physical behavior at the nanometer scale is precisely predicted by quantum mechanics as expressed by the Schrödinger equation. The Schrödinger equation provides a quantitative understanding of the structure and properties of atoms. The cells of biology, composed of chemicals, molecules, and even atoms, can in principle be accurately described (given enough computing power) by the well-tested formulation of nanophysics.

Keywords: Schrödinger equations, nanophysics, potential energy, Maxwell’s wave.

Модданинг зарралари (электронлар, протонлар, нейтронлар) атомлардан ташкил топган кимёвий моддалардан ташкил топган ҳар қандай нарсанинг кичиклиги чегараларини таъминлайди. Бу зарралар бўйсунадиган қоидалар макроскопик моддалар қоидаларидан фарқ қилади. Қоидаларни тушуниш атомлар ва кимёвий моддаларнинг тузилишини

тушуниш учун фойдалидир. Ушбу қоидаларни ва ёруғликнинг тўлқин ва заррача табиати ўртасидаги муносабатни тушуниш, шунингдек, ҳар қандай масштаблаш жараёнида уларнинг ўлчамлари атом ўлчамига кичрайганда пайдо бўладиган қурилмалар ва машиналарнинг хатти–ҳаракатларидан оғишларни тушуниш учун калит ҳисобланади.

Берилган физик вазиятда заррачанинг жойлашишини тавсифловчи тўлқин функсиясини $\Psi(x,t)$ таъминлаш учун тенглама Шредингер томонидан тақдим этилган [1]. Бу тенглама сирли кўриниши мумкин, лекин аслида бундай эмас, ҳеч бўлмаганда орқага қараб. Ҳар қандай муваффақиятли тўлқин тенгламаси ДеБрогли материя–тўлқин муносабатларини [2], $E=\hbar\omega$ ва $p=\hbar k$ ($\lambda=h/p$) акс еттириши керак. Тўғри тенглама Девиссон ва Гермернинг электрон дифраксия кузатувларига мос келиши учун эркин заррача учун $\Psi(x,t) = L^{-1/2}\exp(ikx-i\omega t)$ ҳаракатланувчи тўлқин еритмасини таъминлаши керак [3].

Тўғри материя–тўлқин тенгламасини топиш бўйича қўшимча йўл–йўриқ элементар физикадан бошлаб барча электромагнит тўлқинлар учун Максwелл тўлқин тенгламаси томонидан берилган,

$$\partial^2\Psi(x,t)/\partial x^2 - \varepsilon_0\mu_0\partial^2\Psi(x,t)/\partial t^2 = 0. \quad (1)$$

Ҳозирги вақтда $\Psi(x,t)$ **E** ёки **B** векторларининг компонентини (масалан, Eγ.) ифодаловчи бу тенглама электр ва магнитланишнинг экспериментал тарзда аниқланган қонунларини бирлаштириш орқали олинган. Максвелл тўлқин тенгламасининг (1) иккинчи ҳосилаларини ҳаракатланувчи тўлқин функсияси $\Psi(x,t)= \exp(ikx-i\omega t)$га қўлласак, топамиз.

$$\partial^2\Psi(x,t)/\partial x^2 = -k^2\Psi(x,t),\ \partial^2\Psi(x,t)/\partial t^2 = -\omega^2\Psi(x,t). \quad (2)$$

(2) муносабатларни (1) тенгламага алмаштириш шартни ҳосил қилади

$$[-k^2 + \omega^2\varepsilon_0\mu_0]\ \Psi(x,t) = 0. \quad (3)$$

Бу тенглик $\omega/k= (\varepsilon_0\mu_0)^{-1/2} = 2{,}99793 \times 10^8$ м/с ни талаб қилади. Бу тезлик ёруғликнинг ўлчанадиган тезлиги бўлиб, барча электромагнит тўлқинларнинг келиб чиқишини ёруғликка ўхшашлигини аниқ кўрсатади.

Юқоридаги (3) қавслардаги омил ёруғлик тўлқинининг тезлигига тегишли. Энди савол шунга ўхшаш қавс ҳосил қилиш учун материя тўлқини тенгламасини қандай яратишдир, атама материя бўйича баъзи шартларни беради.

Шредингер тенгламалари бир ўлчовда

Материя тўлқин тенгламасида мос келадиган қавсланган омил учун яхши тахмин заррача энергиясининг баёноти $K+U=E$ ёки ДеБрогли муносабатларидан фойдаланган ҳолда:

$$[\hbar^2k^2/2m+U-\hbar\omega]\ \Psi(x,t) - 0. \quad (4)$$

Энергиянинг сақланиши ҳақидаги ушбу тўғри баёнотга асосланиб ва $\Psi(x,t) = \exp(ikx-i\omega t)$ ечимини билган ҳолда, тенглама аввалгидек $\partial^2\Psi(x,t)/\partial x^2$ ни ўз ичига олиши керак. Бундан ташқари, энергиянинг сақланиш баёнотида $\hbar\omega$ ни ҳосил қилиш учун биринчи вақт ҳосиласи $\partial\ \Psi(x,t)/\partial t = -i\omega\ \Psi(x,t)$ керак бўлади, бу (4) қавс омилида пайдо бўлади.

Вақтга боғлиқ тенглама

Шу асосда, бир ўлчовли ҳолатда Шредингер тенгламаси, вақтга боғлиқ бўлган $U(x,t)$ потенциалига эга.

$$-\hbar^2/2m\ \partial^2\ \Psi(x,t)/\partial x^2 + U(x,t)\ \Psi(x,t) = i\hbar\ \partial\ \Psi(x,t)/\partial t = H\ \Psi. \quad (5)$$

$H\ \Psi$ Тенгламанинг чап томони баъзан ёзилади, H оператор тенгламанинг чап томонида энергия шартларини ифодалайди.

Вақтга боғлиқ бўлмаган тенглама

Кўпинча потенциал U вақтга боғлиқ бўлмаса, маҳсулот тўлқин функцияси

$$\Psi(x,t)= \psi(x)\varphi(t). \quad (6)$$

Юқоридаги вақтга боғлиқ тенгламага алмаштирилса, ҳосил

$$\varphi(t)-\exp(-iEt/\hbar), \quad (7)$$

ва вақтдан мустақил Шредингер тенгламаси,

$$-(\hbar^2/2m)d^2\psi(x)/dx^2 + U\psi(x) = E\psi(x), \quad (8)$$

$\psi(x)$ ва E энергия учун ечилиши керак. $\psi(x)$ ечим тенгламани, шунингдек чегара шартларини ҳамда физик талабларни қондириши керак.

Жисмоний талаблар ψ(x) узлуксиз ва узлуксиз ҳосилага эга бўлиши, У чексиз бўлган ҳоллар бундан мустасно. Иккинчи талаб шундан иборатки, ψ^*(x)ψ(x) нинг x нинг бутун диапазонидаги интеграли чекли бўлиши керак, шунинг учун нормализация топилади. Бу, масалан, реал экспоненсиал ечимлар exp(kx), exp($-kx$) тенгламани қаноатлантирса, ижобий экспоненсиал ечим физик бўлмаган деб рад этилиши мумкинлигини англатиши мумкин.

Заррачанинг импулси бизнинг ишимизда $-i\hbar\partial/\partial x$ билан боғланган, у exp(ikx) билан ишлаганда $\hbar k$ марта exp(ikx) моментини беради. Бу ҳақиқат эканлигини кўриш мумкин. мураккаб, тўлқин функсиясидан фарқли ўлароқ, ҳақиқий импулсли заррачани ифодаламайди.

Бир ўлчовда тутилган заррача

Энг оддий муаммо – бу бир ўлчамда тутилган заррача. Фараз қилайлик, $0<x<L$ учун $U=0$, бошқа жойда $U\to\infty$, ψ(x)=0. $0<x<L$ учун тенглама айланади

$d^2\psi(x)/dx^2 + (2mE/\hbar^2)\,\psi(x) = 0$. (9)

Бу юқорида кўриб чиқилган оддий гармоник осилатор тенгламаси $d^2x/dt^2+(k/m)x=0$ билан бир хил шаклга эга, шунинг учун $x = x_{max}\cos(\omega t + \delta)$ ва $\omega = (k/m)^{1/2}$ ечимларни худди шундай ёзиш мумкин.

$\psi(x)=A\sin kx + B\cos kx$, бу ерда (10)

$k=(2mE/\hbar^2)^{1/2} =2\pi/\lambda$. (11)

$x= 0$ ва $x = L$ да чексиз потенсиал деворлари $\psi(0)= \psi(L)=0$ ни талаб қилади, яъни B=0. Яна чегара шарти $\psi(L)=0=A\sin kL$ шуни англатадики

$kL = n\pi$. n = 1,2 ... билан (12)

Бу, ўз навбатида, беради

$E_n =\hbar^2 (n\pi/L)^2/2m=n^2h^2/8mL^2$, n=1,2,3,... (13)

Рухсат берилган энергиялар n бутун квант сонининг квадрати ортиб боришини, L камайган сари энергиялар квадратик ортиб боришини кўрамиз.

Ниҳоят, тўлқин функсиясининг нормализация константаси $\psi_n(x)=A\sin(n\pi x/L)$ заррачани бирор жойда топиш эҳтимолини яратиш учун танланиши керак бирлик бўлиш учун тузоқ. Шундай қилиб

$A^2\int_0^L sin^2\,(n\pi x/L)dx = 1$ (14)

$A=(2/L)^{1/2}$ деган маънони англатади.

$k=n\pi/L$ нинг рухсат этилган қийматлари учун шарт эквивалент

$L= n\pi/2$, (15)

скрипка торидаги тўлқинлар учун ҳам худди шундай ҳолат.

Ушбу оддий муаммонинг аниқ ечими дискрет рухсат этилган энергия ва мос келадиган тўлқин функсиялари мавжуд бўлган одатий нанофизик хатти–ҳаракатни кўрсатади. Тўлқин функсиялари заррачани аниқ аниқлай олмайди, улар фақат маълум диапазонда заррачани топиш эҳтимоли ҳақидаги баёнотларни беради.

Масалан, n=3 учун эҳтимоллик тақсимоти $P_3(x) = (2/L)\sin^2(3\pi x/L)$. Бу нормаллаштирилган функсия 0, L, оралиғида учта бир хил чўққиларга эга ва текшириш орқали $L/3$ дан $2L/3$ гача бўлган ораликда заррачани топиш эҳтимоли айнан 1/3 эканлигини кўриш мумкин. Квант сони n катталашган сари, $P_n(x)$ функсия классик эҳтимоллик тақсимотига, $P=1/L$ га яқинлашади, чунки $\sin^2(n\pi x/L)$ тебранишларини кузатиш учун жуда тез бўлади.

Эритмаларнинг чизиқли бирикмалари

Шредингер тенгламаси каби дифференсиал тенгламаларнинг қўшимча хусусияти шундаки, ечимларнинг чизиқли бирикмалари ҳам ечим ҳисобланади. Шундай қилиб, мумкин бўлган чизиқли комбинацияланган ечим

$\Psi_{1+3}(x,t) = A[\sin(\pi x/L)\exp(-iE_1t/\hbar) + \sin(3\pi x/L)\exp(-iE_3t/\hbar)]$. (16)

Бу вақтга боғлиқ бўлган эҳтимоллик зичлигига олиб келади.

Кутиш қийматлари

P(x) функсияси аниқ кутилган қийматларни олиш учун ишлатилиши мумкин. Мисол учун, бир ўлчовда тутилган заррачада,

$$< x_n^2 >= (2/L)\int_0^L x^2 sin^2(n\pi x/L)dx = (L^2/3)\left(1 - \frac{3}{n^2\pi^2}\right),\ n=1,2...\ (17)$$

Бу натижа, ҳар қандай n квант сони учун аниқ, n квант сони катталашганда классик қийматга ($L^2/3$) яқинлашади. Бу қуандаги умумий хусусиятдир. Квант механикаси, классик натижа катта квант сонлари чегарасида тикланади.

Координатанинг кутилган қиймати, x, m, n ҳолатлар орасидаги

$$< x_{m,n}^2 >= (2/L)\int_0^L xsin(m\pi x/L)\exp(-iE_m t/\hbar)\ sin(n\pi x/L)\exp(iE_n t/\hbar)dx -$$

$x_{m,n}$ exp $(-\mathrm{i}\omega_{m,n}t)$(18)

Қаерда $\omega_{m,n}= (Em–E_n)/\hbar$.

Зарядланган заррача учун $p=e<x_{m,n}>$ тебранувчи электр диполни ифодалайди фотоннинг ютилиши ёки эмиссиясига олиб келиши мумкин бўлган момент.

Ҳар қандай аниқ квант ҳолатида энергиянинг кутилган қиймати

$$< E >= (2/L)\int_0^L \psi * \mathrm{H}\quad \psi dx.\ (19)$$

Икки заррали тўлқин функсияси

1D тузоқда бир вақтнинг ўзида мавжуд бўлган иккита ўзаро таъсир қилмайдиган зарралар учун тўлқин функсияси мос равишда n, m квант ҳолатларида қуйидагича ёзилиши мумкин.

$\psi_{n,m}(x_1,x_2) = \mathrm{A}^2 \sin(n\pi x_1/L)\sin(m\pi x_2/L) = \psi_n(x_1)\,\psi_m(x_2)$. (20)

Тегишли эҳтимоллик зичлиги

$P_{n,m}(x_1,x_2)= \psi^*_{n,m}(x_1,x_2)\,\psi_{n,m}(x_1,x_2)$. (21)

Тўсиқнинг кириб бориши

Агар муаммо U_0 потенциал ҳудудини $0<x<t$ кенглиги билан чеклаш орқали туннел тўсиғининг кириб бориш муаммосига айлантирилса, туннел ўтказиш эҳтимолининг $|\mathrm{T}|^2$ муҳим боғлиқлиги exp(–2κt) га пропорционал бўлади. Бундай ҳолда, катта мусбат x учун, масалан, F амплитудаси бўлган ҳаракатланувчи тўлқин бўлади: $\psi(x) = F\exp(\mathrm{i}kx)$ ва тегишли узатиш эҳтимоли нисбат сифатида аниқланади.

$$|\mathrm{T}|^2 = |\mathrm{F}|^2 / |\mathrm{A}|^2\ (22)$$

бу ерда A – салбий x қийматларидан келадиган тўлқиннинг амплитудаси. Ушбу муаммони ҳал қилиш учун учта алоҳида минтақадаги тўлқин функсиялари: $x<0$, $0<x<t$ ва $x>t$ ёзилади ва қийматлари ва қияликлари $x=0$ ва $x= t$ да мос келиши учун созланади. Натижа $\kappa t >> 1$ бўлса

$$|T|^2 = \frac{16k^2\kappa^2\exp(2\kappa t)}{(k^2+\kappa^2)^2}\ (23)$$

бу ерда белгилар юқоридаги каби бир хил маънога эга ва экспоненсиал функция доминант қарамликни таъминлайди.

4.6.5 Икки ва уч ўлчовда тутилган зарралар: квант нуқта

Шредингер тенгламасини уч ўлчовга умумлаштириш

$(\hbar^2/2m)\nabla^2\psi(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r})\,\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$, (24)

бу ерда $\nabla^2 = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2$ ва $\mathbf{r} – x,y,z$ компонентли вектор.

Деворлари ўтиб бўлмайдиган L^3 ҳажмли уч ўлчамли чексиз тузоқдаги заррачанинг ечимлари қуйидагича берилганлигини кўриш қийин эмас.

$\psi_n(x,y,z)=(2/L)^{3/2}\sin(n_x\pi x/L)\sin(n_y\pi y/L)\sin(n_z\pi z/L)$, бу ерда n = 1,2... ва ҳоказо, (25)

ва

$E_n=[h^2/8mL^2](n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$. (26)

Ушбу оддий натижалар икки ўлчовли қутиларга, шунингдек, $L_x\,L_y\,L_z$ тенг бўлмаган ўлчамдаги қутиларга осонгина мослаштирилиши мумкин.

Адабиётлар рўйхати:

1. Е. Шродингер, Аннален дер Пҳйсик 79, 361 (1926).

2 Л. де Брогли, Анн. де пҳйс, 3, 22 (1925).

3 С. Дависсон ва Л. Гермер, Прос. Натл. акад. Сси. 14, 619 (1928).