Глава 1

Введение

1.1 Содержание

- Предмет изучения
- Квантовая механика электронов. Границы классичечкого и квантового описаний
  - ◇ Свободные частицы
  - ◇ Частицы ограниченные в пространстве. “Квантовая яма”
  - ◇ Частицы в трехмерном “потенциальном ящике”
  - ◇ Собственные состояения и их вырождение

1.2 Введение: предмет изучения

Размеры элементов современных интегральных схем приближаются к фундаментьальным пределам длин (длина волны электрона, и пр.). Число электронов в некоторых наноустройствах (например, кввнтовые 0-мерные точки, одноэлектронные островки, сужения и.т.д.)становится вполне счетным $\sim 100 \div 1$ и совсем на является макроскопически большим, что оправдывало бы их описание в стандартных терминах среднего поля и макросокпической термодинамики. Поэтому нано электронные устройства грядущего поколения могут проявлять неожиданные свойства вследствие квантовых эффектов, флуктуаций, эффектов четности/нечетности числа частиц.

Замечание Пока число частиц большое, $N \gg 1$, флуктуации их числа $\delta N/N \propto \sqrt{N}^{-1} \ll 1$ малы; однако, $\delta N/N$ приближается к 1 по мере того как $N \to 1$.

Что такое **квантовые эффекты ?**
Эффекты, в которых волновая природа частиц существенна. Пререквизит - интерференция электронных волн. Длина, на которой электронная волна сохраняет когерентность (т.н. длина сбоя фазы l_φ) становится сравнимой с характерными размерами задачи.

Что такое **квазиклассические эффекты ?**
Характерные размеры в задаче (например, размеры образца, структуры) становятся сравнимыми с де-Бройлевской длиной волны. Дискретность уровней энергии становится существенной. В задаче появляется параметр действие h. Пример - кван-

товые осцилляции проводимости (эффект Шубникова-де Газза), размерное квантование уровней энергии и пр. Конечно, это разделение довольно условно и зачастую при более тщательном рассмотрении в квазиклассической задаче возникает необходимость учета интерференции.

Что такое мезоскопика ? Обычная макроскопическая физика оперирует с объектами, содержащими большое число частиц $N \ll 1$ (в нашем случае, электронов), так что их термодинамическое описание в терминах *среднего поля* хорошо применимо. В другом предельном случае, микроскопическая физика (такая как физика элементарных частиц или молекулярная физика) имеет дело с объектами, сордержащими малое число частиц, порядка единицы. Мезоскопическая физика занимает промежуточную область, в которой число частиц в изучаемом объекте хотя и велико, но флуктуации физических параметров ($\propto \sqrt{N}$) не. являются пренебрежимо малыми

Мезоскопическая физика (или необходимость рассмотрения задачи в терминах мезоскопики, в приближении мезоскопики) возникает не только на почве миниатюризации. Зачастую, в образце длина когерентности, или точнее, **длина сбоя фазы** становится сопоставимой с длиной волны де Бройля. Соответственно, область мезоскопики определяется не только размером образца. Числа электронов n в устройстве может стать не бесконечным, а **счетным**, так что, например, свойства систем содержащих четные $n = 2i$и нечетные $2i+1$ числа электронов могут стать существенно различными.

Конечно, границы раздела между этими областями физики: мезоскопикой и микроскопикой, микроскопикой и мезоскопикой довольно условны. Например, для описания свойств многоэлектронных атомов тяжелых элементов, неплохо работает приближение Ферми-жидкости.

Конструирование искусственных объектов с характерными масштабами порядка длины волны позволяет создавать т.н. искусственные атомы (квантовые точки, QD) и искусственные одномерные цепочки (квантовые провода). Электроны несут электрический заряд и между ими должны действовать силы кулоновского взаиодействия. При малых межэлектронных расстояниях в трехмерной решетке (порядка межатомных расстояний, 1-3Å, эти силы должны были бы быть огромными.

Q: Почему же вообще работает одоэлектроное приближение, на котором основана вся квазиклассиче-

ская физика твердого тела и физика полупроводников?
Почему же электронные свойства полупроводников, включая транзисторы и диоды описываются квазиклассическими одноэлектронными уравнениями ?

А: Дело в том, что электрические поля, создаваемые электронами, компенсируются полями заряженных ионов решетки. Поскольку система в целом электронейтральна, электроны вовсе не стремятся выпрыгнуть из твердого тела.

Значит ли это, что межэлектронные взаимодйствия не нужно учитывать вообще? Отнюдь нет. Между электронами действуют силы квантового происхождения, вследствие т.н. обменной энергии, связанные со спином, симметрией и статистикой квазичастиц. Вообще говоря, чем ниже размерность системы, тем важнее эти взаимодействия. Обменная энергия приводит к изменению свойств квазичастиц. Если мы хотим описывать их, для наглядности, в одночастичном приближении, то мы должны учесть изменение, вследствие межчастичных взаимодействий, таких параметров, как эффективная масса, энергия, эффективный g-фактор. Как следствие этого, для ансамбля из взаимодействующих электронов, перенормируются электронная спиновая восприимчивость и электронная сжимаемость. Например, сжимаемость меняет знак!

В привычной, обыденной макроскопической физике эти взаимодействия как правило слабы. Однако, даже в 3D случае, имеются исключения - для таких металлов, как например Pd, взаимодействия сильны и, вследствие этого, примеси Pd в металлах зачастую приводят к появлению ферромагнетизма. В искусстенных низкоразмерных мезоскопических крошечных объектах кулоновские взаимодействия между электронами играют важную роль и приводят к ряду очень красивых и интересных эффектов. В частности, функционирование некоторых мезоскопический устройств (например, таких как одноэлектронный транзистор) основано на эффекте Кулоновского взаимодействия между электронами.

Искусственные квантовые структуры, в частости, квантовые точки, квантовые ямы, квантовые провода являются основой нового поколения устройств, таких как ячейки квантовых вычислений, лазеры а квантовых точках, одноэлектронные транзисторы и т.п.

1.3 Квантовая механика электрона. Повторение - мать учения

Рассмотрим одиночную частицу (электрон) движущуюся, для простоты, в одном измерении. Элементарная классическая механика основана на представлении о точечной частице, пространственное положение которой x и импусьс p (или скорость $v = p/m$) возникают в уравнении движения. Эти величины прямо даются законами Ньютона или, в более продвинутой формулировке аналитической механики могут быть вычислены из функций Лагранжа или Гамильтона.

Волновая механика - это элементарная формулировка квантовой теории, которая основана на понятии волновой функции $\Psi(x, t)$. Такие величины как положение и импульс не даются прямо, но могут быть выведены из Ψ. Вместо законов Ньютона мы имеем волновое уравнение, которое определяет эволюцию волновой функции $\Psi(x, t)$. Для одномерного случая волновое уравнение имеет форму

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t)+V(x,t)\Psi(x,t)=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t), \quad (1.1)$$

и это есть нестационарное уравнение Шредингера. Так ли это - требует проверки и мы разберемся чуть попозже. Это уравнение описывает частицу, движущуюся в районе действия изменяющегося потенциала $V(x)$. Пусть $V(x,t) \approx V(x)$ - медленно изменяющаяся во времени функция. Силы как то спрятаны и не входят явно.

Удобное упрощение получается рассмотрением разделяемых решений - факторизацией, в которой зависимости от x и t развязаны друг от друга: $\Psi(x,t) = \psi(x)T(t)$. Заглавное Ψ использовано для зависящей от времени волновой функции, а строчное ψ - для стационарной, не зависящей от времени функции. Подставляя эту факторизованную волновую функцию в нестационарное уравнение Шредингера (**??**) и деля обе части на ψT, получаем:

$$\frac{1}{T}i\hbar\frac{dT(t)}{dt}=\frac{1}{\psi}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+V(x)\psi(x)\right]. \quad (1.2)$$

Теперь, в результате разделения переменных, слева стоит функция только от t, а справа - только от x. Это имеет смысл только если обе части равны константе, скажем E. Тогда, рассматривая только левую часть, получаем

$$\begin{aligned} \frac{d\ln T}{dt} &= \frac{-iE}{\hbar}, \qquad \text{или} \\ T(t) &\propto \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) \equiv \exp(-i\omega t), \end{aligned} \tag{1.3}$$

где $E = \hbar\omega$. Это описывает простое гармоническое изменение со временем. 0̌.2inspace

Q: Можно ли заменить "exp"на "sin"?

Q: Можно ли изменить "$-$"знак на "+ так чтобы было $\exp(+i\omega t)$?

A: Строго говоря, нет. Это форма зависящего от времени уравнения Шредингера требует именно $\exp(-i\omega t)$ во всей квантовой механике. Это специфика квантовой механики и также наш недостаток - мы просто не умеем инвертировать направление времени и причинно-следственных связей. В противоположность этому, в классической физике, например, в теории колебаний $\exp(+i\omega t)$ - возникает часто. Или в радиотехнике и электротехнике $\exp(+j\omega t)$ - есть обыденная вещь.

Пространственная (правая) часть разделенного уравнения Шредингера становится

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+V(x)\psi(x)=E\psi(x) \qquad (1.4)$$

Как видите, это - не зависящее от времени одномерное уравнение Шредингера. Для перехода к трехмерному случаю надо ∂^2/dx^2 заменить на $\nabla^2=\partial^2/dx^2+\partial^2/dy^2+\partial^2/dz^2$. В зависимости от конкретного вида функции $V(x)$ получаются разные решения $\psi(x)$. В целом, решение нестационарного уравнения Шредингера имеет факторизованный вид:

$$\Psi(x,t)=\psi(x)\exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right). \qquad (1.5)$$

Note: Мы обозначили константу буквой E, подразумевая, что это есть энергия. Но это еще требуется проверить. Принимая это утверждение сейчас на веру, мы понимаем, что решение нестационарного уравнения Шредингера описывает состояния частицы, имеющей определенную энергию E. Здесь есть некоторая путаница в терминах. Состояния, про которые мы говорим, часто называют “стационарные” состояния. E - собственное значение энергии, которому могут соответствовать несколько состояний. Рассмотрим несколько простых решений.

1.3.1 Свободная частица

Самый простой случай - это частица (для определенности - электрон) в неограниченном пространстве, свободном от полей $V(x) = 0$. Тогда стационарное уравнение Шредингера (**1.4**) упрощается

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi(x). \tag{1.6}$$

Это обычное диф. уравнение второго порядка, т.е. волновое уравнение и его решения можно угадать из простых физ. соображений. Во первых, можно искать решение в виде комплексных экспоненциальных волн $\psi = \exp(+ikx)$ или $\exp(-ikx)$. Во вторых, можно искать решение в виде тригонометрических функций$\psi = \sin kx$ или $\cos kx$. Подставляя любую из этих функций в уравнение (**1.6**) мы видим, что все они являются решениями при условии

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \equiv \epsilon_0(k). \tag{1.7}$$

В классической механике кинетическая энергия $E = p^2/2m$, поэтому чтобы сохранить преемственность, мы заключаем, что $p = \hbar k$. Вспомним основополагающие соотношения мужду энергией и частотой волны:

$$E = \hbar\omega = h\nu \qquad \text{(Эйнштейн)} \tag{1.8}$$
$$p = \hbar k = \frac{h}{\lambda} \qquad \text{(де Бройль)} \tag{1.9}$$

Разделив энергию на $\hbar$ получим дисперсионное сооношение между частотой ω и волновым числом k:

$$\omega = (\hbar/2m)k^2.$$

Это соотношение нелинейно, поэтому скорость волновых частиц является функцией их частоты и со скоростью надо обращаться более аккуратно чем в классической механике. В частности,

$$\text{(фазовая скорость)} \qquad v_{\text{phase}} = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2m} = \frac{p}{2m} \tag{1.10}$$
$$\text{(групп. скорость)} \qquad v_{\text{group}} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m} \equiv v_{\text{classic}},$$

где v_{classsic} - классическая скорость.

Волновой пакет, изображенный на Рис.1.1 иллюстрирует различие между этими двумя скоростями. Волновое заполнение внутри пакета (“рябь”) движется с фазовой скоростью v_{ph}, в то время как огибающая волнового пакета перемещается с групповой скоростью v_{group}. Поскольку этот пакет представляет частицу (электрон), то нам, в первую очередь важнее знать поведение волнового пакета в целом, чем движение "ряби" внутри пакета. Конечно, это понимание приятно и подтверждает нашу интерпретацию того, что групповая скорость совпадает с классической скоростью частицы.

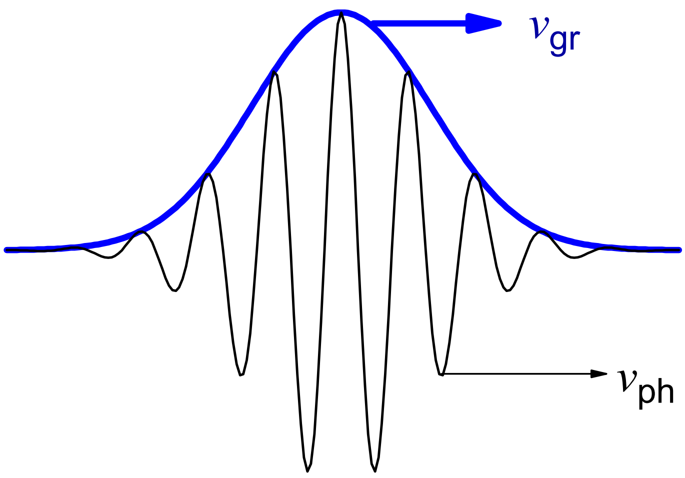

Рис. 1.1: Волновой пакет, огибающая которого движется с групповой скоростью, в то время как внутреннее заполнение пакета движется с фазовой скоростью.

Несколько замечаний:

1) Волновой пакет, представляющий частицу, размазан в пространстве, в отличие от частицы в классической физике, где она представляется точкой с точно известными координатами. Мы не можем точно

задать координаты волновой частицы (соотношение неопределенности Гейзенберга).
2)Кин. энергия, как мы ее определили $E = \hbar^2 k^2/2m$ - положительная величина, если k является вещественным. Когда $E < 0$, то k становится мнимым числом.
3) Можно найти такие решения, которые расходятся при $x \to \pm\infty$, например $\psi(x) = \exp(kx)$, $\psi(x) = \exp(-kx)$, $\psi(x) = \sinh(kx)$ с $E = -\hbar^2 k^2/2m$. Эти волновые функции вещественны, но все расходятся при $x \to \pm\infty$, по крайней мере в одном направлении. Расходящаяся волновая функция нефизична и такие решения имеют физ. смысл только в ограниченной области пространства.

1.3.2 Частицы ограниченные в пространстве. Квантовая яма

Если частица вынуждена находиться в ограниченном пространстве, то эта ситуация называется “квантовой ямой” или “частицей в ящике”. Простейший пример - бесконечно глубокая яма с прямоугольными стенками, изображенная на Рис.1.2. Электроны имеют нулевую потенциальную энергию в диапазоне $0 < x < a$, где a-полная ширина ямы. Бесконечно высокие стенки потенциальной ямы препятствуют их нахождению за пределами ямы.

Уравнение Шрҷдингера для движения внутри ямы идентично уравнению движения в свободном пространстве, поскольку мы положили потенциальную энергию $V = 0$. Поэтому решения - такие же и могут быть записаны как
$\exp(+ikx)$, $\exp(-ikx)$, $\sin(kx)$, $\cos(kx)$ с кин. энергией $E = \hbar^2 k^2/2m$. Никто не запрещает нам рассматривать как положительные, так и отрицательные значения энергии. Для отрицательной энергии k будет мнимым и волны могли бы являться вещественными экспоненциальными или гиперболическими функциями. Наложение граничных условий, однако сузит выбор функций.

Бесконечно высокий барьер представляет собой бесконечно высокую потенциальую энергию снаружи ямы, $x < 0, x > a$. Уравнение Шрҷдингера (**??**) само по себе не должно содержать бесконечные члены и чтобы $V(x)\psi(x)$ оставалось конечным, $\psi(x)$ должно равняться нулю при $x < 0, x > a$. Кроме того, $\psi(x)$ не должно иметь разрыва на границе, поскольку $\psi(x)^2$ имеет физ. смысл.

Q: Какие еще условия запрещяют разрывное поведение $\psi(x)^2$?

A: Если $\psi(x)$ терпит разрыв, то скорость частицы и, следовательно, кинетическая энергия становятся бесконечно большими. Поскольку мы предположили, что полная энергия частицы конечна, то такие решения противоречат нашему предположению и мы их отбрасываем.

Из условия непрерывности на границе получаем $\psi(0) = 0$ и $\psi(a) = 0$. Первому условию удовлетворяют функции $\psi(x) = \sin(kx)$ и $\psi(x) = \sinh(kx)$ для любого значения k. Однако, чтобы удовлетворить второму условию мы должны выбрать только $\sin(kx)$. Это решение должно обратиться в 0 при $x = a$, отсюда $k = n\pi/a$ и искомые решения имеют вид:

$$\psi_n(x) = A_n \sin\frac{n\pi x}{a}, \qquad \varepsilon_n = \varepsilon_0(k_n) = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2\pi^2 n^2}{2ma^2} \tag{1.11}$$

Числа $n = 1, 2, 3, \ldots$ являются квантовыми числами, которые маркируют состояния.

Q: Откуда возникло квантование, т.е. дискретные значения энергии?

A: из граничных условий, которые ограничивают движение частицы. Частицы, которые могут свободно двигаться во всем пространстве, имеют непрерывный спектр. Если движение частиц ограничено в пространстве, то их энергия квантуется.

Замечание 1: Часто бывает, что в одном интервале энергий частицы могут двигаться свободно, а в другом интервале - ограничены в пространстве. Тогда возникает смесь дискретных и непрервных уровней энергии.

Замечание 2: В наинизшем состоянии энергия $\varepsilon_1 > 0$. Это контрастирует с классической механикой, в которой в наинизшем состоянии энергии частицы сидят неподвижно на дне потенциальной ямы, с нулевой кинетической энергией и имеют $E = 0$. В нашем упрощенном нестрогом решении это соответствут нулевой амплитуде волновой функции и значит отсутствию частицы вообще. В строгом решении $E = 0$ запрещено еще и принципом непределенности, (рассмотрим дальше), поэтому даже в наинизшем по энергии состоянии имеется энергия нулевых колебаний.

Замечание 3: Волновые функции в прямоугольной яме имеют важное симметрийное свойство. Те, что соответствуют нечетным n являются четными функциями координаты $(x - a/2)$ и наоборот.

Q : Отчего эта симметрия возникает ?
A : Это простая закономерность следует из того, что нумерация уровней начинается с 1, а не с 0 или другого четного числа.

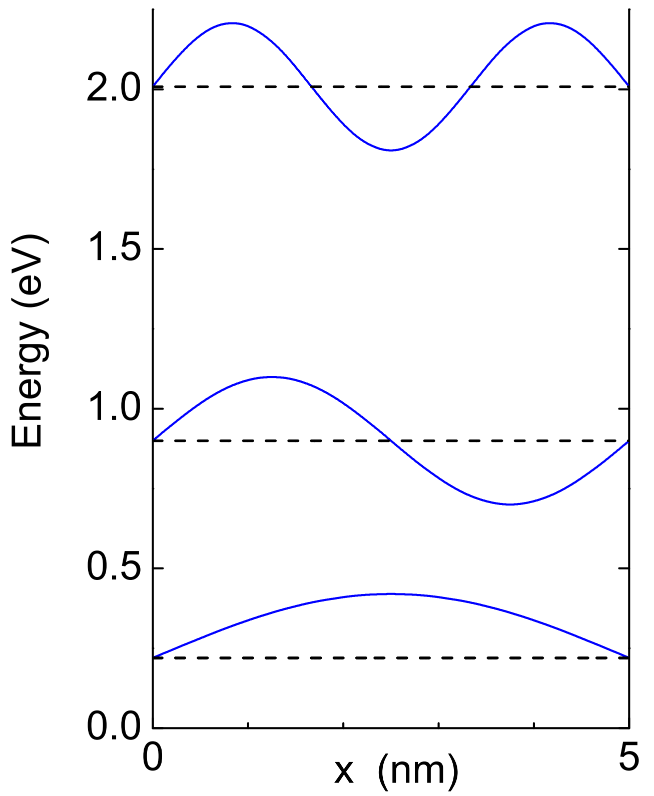

Рис. 1.2: Волновые функции и уровни энергии электрона в бесконечно глубокой прямоугольной яме шириной 5нм.

Q:Почему мы отбросили решения с разрывом на стенках ($\psi(0) \neq 0, \psi(a) \neq 0$?

A: Если $\psi(x)$ терпит разрыв, то скорость частицы и, следовательно, и кинетическая энергия становятся бесконечно большими. Поскольку мы предположили, что полная энергия частицы конечна, то такие решения противоречат нашему предположению и мы их отбрасываем.

Q: Мы допустили что $d\psi/dx$ на стенках ямы претерпевает разрыв. Что означает разрывность производной, хорошо это или плохо ?

A: Это означает, что на частицу в точках $x = 0, x = a$ со стороны стенки действует бесконечно большая сила. Ничего плохого в этом нет, для сохранения энергии (упругое столкновение со стенкой) время взаимодействия должно обращаться в 0.

Problem to solve:

Получить то же самое (т.е. уровни энергии в прямоугольной яме бесконечной глубины) из простых качественных соображений, используя соотношение неопределенности.

Solution:

$$\begin{aligned}
\delta p \delta x &= h \\
\delta x &= a \\
\delta p &= 2p \quad \text{поскольку } p \text{ меняется от } +p \text{ до } -p \text{ при отскоке от стенки} \\
p &= h/2a \\
E &= \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{8ma^2} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}. \qquad \text{Это для } N = 0
\end{aligned}$$

Problem to solve:

Получить то же самое, не зная про соотношение неопределенности, учитывая лишь (а) то, что частица описывается волновой функцией и (б) граничные условия для $\psi(x)$.

Solution:

$$\begin{aligned}
\frac{\lambda}{2} n &= a, \qquad n = 1, 2, ... \\
p &= \hbar k = \frac{h}{\lambda} = \frac{hn}{2a} \\
E &= \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2 n^2}{8ma^2}
\end{aligned}$$

Как это все проверить экспериментально ? Оптическая спектроскопия уровней энергии в квантовой яме.

Как сделать квантовую яму?

Квантовая яма с бесконечными стенками - это довольно искусственная модель, которая хороша для лекций, но на практике почти не используется, если даже что-то подобное можно изготовить. Эта модель хороша просто потому, что ее решения просты и их надо помнить для понимания качественного характера решений в более реалистичных ситуациях. Все это мы рассмотрим, но позже.

1.3.3 Частица в трехмерном потенциальном ящике

Запишем теперь трехмерное уравнение Шрҷдингера. Мы таким же образом факторизуем решение и разделяем пространственную и временную части. Тогда трехмерное уравнение, не содержащее времени, записывается в виде

$$\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(x, yz)\psi = E\psi \tag{1.12}$$

Потециал ящика (куб с ребром L):

$$V = 0 \quad \begin{cases} 0 < x < L \\ 0 < y < L \\ 0 < z < L \end{cases}$$

и $V = \infty$ во всем стальном пространстве. Как и ранее, требуем, чтобы ψ функция обращалась в нуль на поверхности ящика и оставалась равной нулю вне ящика. Получаем, аналогично ранее сделанному:

$$\psi = 0 \quad \begin{cases} x = 0, L \\ y = 0, L \\ z = 0, L \end{cases}$$

Опять задача свелась к решению простейшего дифференциального уравнения второго порядка в частных производных:

$$\nabla^2\psi + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0 \tag{1.13}$$

Применяя тот же метод разделения переменных и факторизации, предположим, что ψ функция является произведением

$$\psi(x, y, z) = \psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z) \tag{1.14}$$

Подставляя эту функцию в уравнение Шрҷдингера и деля обе части на $\psi_1\psi_2\psi_3$ получаем:

$$\left(\frac{1}{\psi_1}\frac{\partial^2\psi_i}{\partial x^2} + \frac{1}{\psi_2}\frac{\partial^2\psi_2}{\partial y^2} + \frac{1}{\psi_3}\frac{\partial^2\psi_3}{\partial z^2}\right) + \frac{2mE}{\hbar^2} = 0. \tag{1.15}$$

Каждый из трех членов в скобке является независимым от других. Например, член $[1/\psi_1](\partial^2\psi_i/\partial x^2)$ является функцией только от x. Поскольку коордиаты x, y, z - независимые, то каждый из членов в скобке уравнения должен быть константой. Поэтому уравнение распадается на систему уравнений от одного переменного:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\psi_1}\frac{\partial^2\psi_1}{\partial x^2} &= -k_1^2, \\ \frac{1}{\psi_2}\frac{\partial^2\psi_2}{\partial y^2} &= -k_2^2, \\ \frac{1}{\psi_3}\frac{\partial^2\psi_3}{\partial z^2} &= -k_3^2, \\ k_1^2 + k_2^2 + k_3^2 &= \frac{2mE}{\hbar^2} \end{aligned} \tag{1.16}$$

Решения этих уравнений - экспоненциальные или синусоидальные, в зависимости от того, какими величинами являются k - действительными или комплексными.

$$\begin{aligned} \psi_1 &= \exp(\pm ik_1x), \\ \psi_2 &= \exp(\pm ik_2y), \\ \psi_3 &= \exp(\pm ik_3z). \end{aligned} \tag{1.17}$$

Если каждая из компонент k является чисто мнимой, то решение представляет собой действителую экспоненту. В этом случае гран.условия в точках $x = 0$ и $x = a$ не выполняются. Такое решение имеет физ. смысл при одном гран условии, но для квантовой ямы не годится. Следовательно, имеют смысл только синусоидальные решения с действительным k. Как и для одномерной задачи гран. условия для трехмерного потенциального ящика удовлетворяются набором функций

$$\begin{aligned}
\psi(x,y,z) &= A\sin(k_1 x)\sin(k_2 y)\sin(k_3 z)\\
k_1 &= \frac{n_1\pi}{L}, \qquad n_1 = 1,2,...,\\
k_2 &= \frac{n_2\pi}{L}, \qquad n_2 = 1,2,...,\\
k_3 &= \frac{n_3\pi}{L}, \qquad n_3 = 1,2,...,\\
E &= \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}(n_1^2+n_2^2+n_3^2). \qquad (1.18)
\end{aligned}$$

Note: В трехмерном случае нужны 3 квантовых числа для описания состояния квантовой частицы.

1.3.4 Энергетическое состояние и вырождение

На рисунке изображена схема энергетических уровней для частицы в трехмерной потенциальной яме (ящике). Теперь для обозначения ψ- функции можно использовать квантовые числа, связанные с этой волновой функцией. Т.е., ψ-функцию можно записать как $\psi(n_1, n_2, n_3)$. Она является одним из линейно независимых решений дифф. уравнения. Эта функция обозначает физическое состояние системы, физически отличное от всех других состояний. Термин "квантовое состояние" используется для обозначения состояния системы, описываемого частным линейно-независимым решением уравненя Шредигера. Как

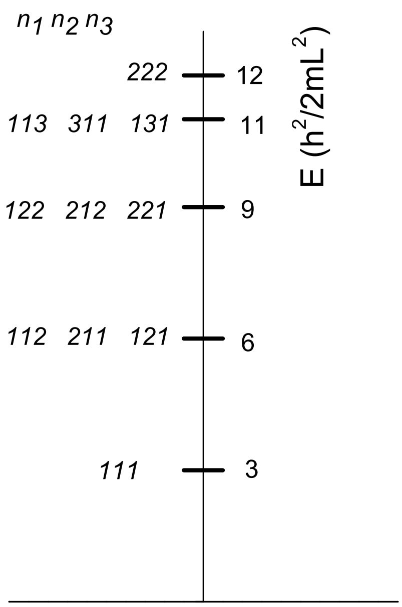

Рис. 1.3: Энергетические уровни частицы в трехмерном потенциальном ящике.

видно из рисунка один и тот же энергетический уровень может быть получен путем задания нескольких различных комбиаций квантовых чисел. Например, второй уровень энергии соответствует квантовым состояниям (112), (211), (121). Соответствующие ψ-функции и связанные с ними квантовые состояния физически отличны друг от друга, как легко проверить. Однако, эти состояния обладают одной и той же энергией. Это называется вырождением. Рассматриваемый второй снизу уровень энергии 3-кратно вырожден. Наинизший уровень энергии на Рисунке **1.3** не вырожден.

Problems to solve: Частица имеет массу 1г. Положение ее центра ограничено в пространстве кругом диаметром 1мкм.
1)Оценить величину неопределенности в измерении импульса.
2) Чему равна наинизшая энергия частицы ?