

Московский государственный технический университет
имени Н. Э. Баумана

Л. К. Мартинсон, Е. В. Смирнов

МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ
К РЕШЕНИЮ ЗАДАЧ
ПО КУРСУ ОБЩЕЙ ФИЗИКИ
РАЗДЕЛ “УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА.
СТАЦИОНАРНЫЕ ЗАДАЧИ КВАНТОВОЙ
МЕХАНИКИ”

Издательство МГТУ им. Н. Э. Баумана

2002

§1. Уравнение Шредингера для стационарных состояний

Основным уравнением нерелятивистской квантовой механики является общее или временное уравнение Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta \Psi + U\Psi \quad (1)$$

Здесь $i = \sqrt{-1}$ - мнимая единица, \hbar - рационализованная постоянная Планка

($\hbar = \frac{h}{2\pi}$), $\Psi(x, y, z, t)$ - волновая функция, описывающая состояние частицы,

$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ - оператор Лапласа, $U(x, y, z, t)$ - потенциальная функция,

определяющая с помощью соотношения $\vec{F} = -gradU$ силу, действующую на частицу. Уравнение (1) позволяет найти волновую функцию $\Psi(x, y, z, t)$ как функцию координат и времени, т.е. найти плотность вероятности нахождения частицы в любой точке пространства в любой момент времени и тем самым полностью описать квантовое состояние частицы, движущейся в силовом поле.

В квантовой механике существует класс задач о движении частицы в силовых полях, для которых потенциальная функция $U(x, y, z, t)$ не зависит явно от времени, т.е. $U(x, y, z, t) \equiv U(x, y, z)$. Такие силовые поля называются стационарными силовыми полями, в этом случае потенциальная функция $U(x, y, z)$ имеет смысл потенциальной энергии частицы. Задачи о движении частиц в таких полях называются стационарными задачами квантовой механики, а соответствующие состояния – стационарными состояниями. Именно анализу стационарных состояний квантовой механики и посвящено настоящее пособие.

Можно показать, что волновая функция частицы, находящейся в стационарном квантовом состоянии, имеет вид

$$\Psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z) \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t} = \psi(x, y, z) \cdot e^{-i\omega t} \quad (2)$$

где E - полная энергия системы. Из (2) следует, что волновая функция

стационарного состояния гармонически зависит от времени с частотой $\omega = \frac{E}{\hbar}$.

Координатную часть волновой функции $\psi(x, y, z)$ в стационарных задачах часто называют просто волновой функцией, учитывая, что зависимость от времени определяется соотношением (2).

Подставляя волновую функцию (2) в уравнение (1) и учитывая связь между ω и E , получаем уравнение для волновой функции $\psi(x, y, z)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta\psi + U\psi = E\psi \quad (3)$$

Это уравнение называется уравнением Шредингера для стационарных состояний. Его решения – функции $\psi(x, y, z)$ и соответствующие значения энергии E – определяются конкретным видом потенциальной энергии $U(x, y, z)$. Уравнение Шредингера для стационарных состояний (3) можно переписать в следующей форме

$$\Delta\psi + \frac{2m_0}{\hbar^2} (E - U)\psi = 0 \quad (4)$$

Отметим, что для стационарных состояний плотность вероятности местонахождения частицы w не зависит от времени. Действительно

$$w = \frac{dP}{dV} = |\Psi(x, y, z, t)|^2 = |\psi(x, y, z)|^2 |e^{-i\omega t}|^2 = |\psi(x, y, z)|^2 e^{-i\omega t} e^{i\omega t} = |\psi(x, y, z)|^2$$

Можно показать, что в стационарных состояниях от времени также не зависят вектор плотности потока вероятности и средние значения физических величин.

В данном пособии рассмотрены случаи движения квантовомеханической частицы в различных стационарных силовых полях: в потенциальных ямах, в области потенциального порога и потенциального барьера. Для указанных силовых полей проанализирован вид волновых функций и энергетический спектр частицы.

§2. Частица в потенциальной яме с непроницаемыми стенками

Рассмотрение стационарных задач квантовой механики начнем с наиболее простой для анализа задачи о движении частицы в потенциальной яме с непроницаемыми, т.е. бесконечно высокими стенками. Такие ямы называют еще потенциальными ящиками, наиболее часто это название применяется по отношению к трехмерной потенциальной яме.

Одномерная потенциальная яма. Рассмотрим частицу, находящуюся в одномерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. В этом случае потенциальная энергия частицы $U(x)$ имеет вид (рис.1)

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0 & \text{— область I} \\ 0, & 0 < x < a & \text{— область II} \\ \infty, & x > a & \text{— область III} \end{cases}$$

Поскольку стенки ямы непроницаемы для частицы, то плотность вероятности обнаружения частицы w , а, следовательно, и сама волновая функция $\psi(x)$ в областях I и III должны быть равны нулю. В области II возможного движения частицы, в которой $U(x) = 0$, волновая функция $\psi(x)$ находится из решения стационарного уравнения Шредингера

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m_0E}{\hbar^2}\psi = 0, \quad 0 < x < a \quad (5)$$

Это уравнение следует решать с учетом граничных условий $\psi(0) = 0$ и $\psi(a) = 0$, которые являются следствием условия непрерывности волновой функции во всех точках пространства, включая непроницаемые для частицы стенки. Для таких однородных граничных условий рассматриваемое уравнение имеет нетривиальные решения только при определенных значениях полной энергии частицы. Действительно, общее решение уравнения (5) можно представить в виде

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

где $k = \sqrt{\frac{2m_0E}{\hbar^2}}$. Из граничного условия $\psi(0) = 0$ следует, что константа $B = 0$, т.е. $\psi(x) = A \sin kx$. Другое граничное условие $\psi(a) = 0$ приводит к соотношению

$$ka = n\pi, \quad n = 1, 2, 3, \dots,$$

из которого находим возможные значения полной энергии частицы, движущейся в яме

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_0 a^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (6)$$

Полученное выражение определяет дискретный энергетический спектр частицы в рассматриваемой задаче. Частица, находящаяся в одномерной потенциальной яме с непроницаемыми стенками, может иметь только дискретные, квантованные, значения энергии, определяемые выражением (6). Число n называется квантовым числом, а соответствующее ему значение E_n - уровнем энергии. Состояние частицы с наименьшей энергией, в данном случае с $n = 1$, называется основным состоянием. Все остальные состояния являются возбужденными: значение $n = 2$ отвечает первому возбужденному состоянию, значение $n = 3$ - второму возбужденному состоянию и т.д.

Состояние частицы в яме, отвечающее определенному квантовому числу n , описывается волновой функцией $\psi_n(x) = A \sin \frac{\pi n x}{a}$. Константу A находим из условия нормировки волновой функции

$$\int_0^a |\psi_n(x)|^2 dx = A^2 \int_0^a \sin^2 \frac{\pi n x}{a} dx = 1.$$

Вычисляя интеграл, получаем $A = \sqrt{\frac{2}{a}}$. Таким образом, нормированные волновые функции, описывающие состояние частицы в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими, стенками имеют вид

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi n x}{a}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (7)$$

Для заданного значения квантового числа n соотношения (6) и (7) определяют полную энергию частицы и волновую функцию, описывающую ее

состояние. Отметим, что волновая функция $\psi_n(x)$ обращается в нуль на стенках ямы и в $n-1$ внутренней точке интервала $(0, a)$. Поэтому с ростом n увеличивается число осцилляций волновой функции (рис.2). Следует подчеркнуть, что минимальное значение энергии частицы в яме E_1 отлично от нуля. Отсутствие квантового состояния с нулевой полной энергией, что соответствовало бы покоящейся в яме частице, является существенно квантовым эффектом. Это согласуется с общим выводом, следующим из соотношений неопределенностей Гейзенберга.

Двумерная потенциальная яма. Рассмотрим частицу, находящуюся в двумерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. В этом случае потенциальная энергия частицы $U(x, y)$ имеет вид

$$U(x, y) = \begin{cases} 0, & (x, y) \in \Omega \\ \infty, & (x, y) \notin \Omega \end{cases}$$

где $\Omega = \{(x, y); 0 < x < a_1, 0 < y < a_2\}$ - прямоугольная область на плоскости (x, y) (рис.3).

Квантовое состояние частицы в такой двумерной задаче определяется двумя квантовыми числами n_1 и n_2 , а соответствующая нормированная волновая функция $\psi_{n_1, n_2}(x, y)$ в области возможного движения Ω имеет вид

$$\psi_{n_1, n_2}(x, y) = \sqrt{\frac{4}{a_1 a_2}} \sin \frac{\pi n_1 x}{a_1} \sin \frac{\pi n_2 y}{a_2} \quad (8)$$

$$n_1, n_2 = 1, 2, 3, \dots$$

На границе области Ω , т.е. на непроницаемых для частицы стенках ямы, волновая функция $\psi_{n_1, n_2}(x, y)$ обращается в нуль, непрерывным образом переходя в тождественный нуль вне Ω .

Полная энергия частицы в квантовом состоянии с заданными значениями квантовых чисел n_1 и n_2 определяется выражением

$$E_{n_1, n_2} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_0} \left[\left(\frac{n_1}{a_1} \right)^2 + \left(\frac{n_2}{a_2} \right)^2 \right] \quad (9)$$

$$n_1, n_2 = 1, 2, 3, \dots$$

Рассмотрим движение частицы в квадратной потенциальной яме, т.е. при $a_1 = a_2 = a$. В этом случае энергетический спектр частицы имеет вид

$$E_{n_1, n_2} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_0 a^2} (n_1^2 + n_2^2) \quad (10)$$

$$n_1, n_2 = 1, 2, 3, \dots$$

Из (10) следует, что одному и тому же энергетическому уровню E_{n_1, n_2} , определяемому квантовыми числами n_1 и n_2 , при $n_1 \neq n_2$ соответствуют два различных состояния частицы, описываемых волновыми функциями ψ_{n_1, n_2} и ψ_{n_2, n_1} . Энергетический уровень, которому соответствует не одно, а несколько состояний частицы, называется вырожденным уровнем, а число соответствующих ему состояний называется кратностью вырождения или степенью вырождения уровня. В случае двумерной квадратной потенциальной ямы кратность вырождения энергетического уровня, для которого $n_1 \neq n_2$, равна двум. Энергетический уровень, которому соответствует одно состояние частицы, называется невырожденным. В двумерной квадратной потенциальной яме невырожденными являются энергетические уровни с $n_1 = n_2$.

Трехмерная потенциальная яма. Рассмотрим частицу, находящуюся в трехмерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками (потенциальном ящике). Обозначим через $G = \{(x, y, z) : 0 < x < a_1, 0 < y < a_2, 0 < z < a_3\}$ внутреннюю область прямоугольного параллелепипеда (рис.4). В данной задаче потенциальная энергия частицы $U(x, y, z)$ имеет вид

$$U(x, y, z) = \begin{cases} 0, & (x, y, z) \in G \\ \infty, & (x, y, z) \notin G \end{cases}$$

Вне потенциальной ямы волновая функция частицы $\psi(x, y, z) \equiv 0$. Внутри ямы волновая функция находится как решение уравнения Шредингера для стационарных состояний. Это решение, определяющее квантовое состояние

частицы, зависит от трех квантовых чисел n_1 , n_2 , n_3 и описывается нормированной волновой функцией

$$\Psi_{n_1, n_2, n_3}(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{a_1 a_2 a_3}} \sin \frac{\pi n_1 x}{a_1} \sin \frac{\pi n_2 y}{a_2} \sin \frac{\pi n_3 z}{a_3} \quad (11)$$

$$n_1, n_2, n_3 = 1, 2, 3, \dots$$

Каждому квантовому состоянию соответствует определенное значение полной энергии частицы

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_0} \left[\left(\frac{n_1}{a_1} \right)^2 + \left(\frac{n_2}{a_2} \right)^2 + \left(\frac{n_3}{a_3} \right)^2 \right] \quad (12)$$

$$n_1, n_2, n_3 = 1, 2, 3, \dots$$

Отметим, что и волновая функция частицы, и ее полная энергия в случае трехмерной потенциальной ямы зависят от трех квантовых чисел.

Рассмотрим движение частицы в кубической потенциальной яме, т.е. будем считать, что $a_1 = a_2 = a_3 = a$. В этом случае энергетический спектр частицы имеет вид

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_0 a^2} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2) \quad (13)$$

$$n_1, n_2, n_3 = 1, 2, 3, \dots$$

Энергетические уровни в кубической яме, для которых $n_1 = n_2 = n_3$, являются невырожденными, все остальные уровни вырождены. Вопрос о кратности вырождения энергетических уровней в кубической яме рассмотрен в задаче 3.

§3. Квантовый гармонический осциллятор

Гармоническим осциллятором называется система, способная совершать гармонические колебания. Рассмотрим одномерный гармонический осциллятор, совершающий колебания вдоль оси x под действием возвращающей квазиупругой силы $F_x = -kx$. Потенциальная энергия такого осциллятора имеет вид (рис.5)

$$U(x) = \frac{kx^2}{2} = \frac{m_0\omega_0^2 x^2}{2}, \quad (14)$$

где $\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m_0}}$ - собственная частота классического гармонического осциллятора.

Таким образом, квантовомеханическая задача о гармоническом осцилляторе сводится к задаче о движении частицы в параболической потенциальной яме (14).

Рассмотрим сначала поведение классического гармонического осциллятора. Пусть макроскопическая система с энергией E совершает колебания в силовом поле (14) (рис.5). Точки a_0 и $-a_0$, в которых полная энергия частицы равна потенциальной энергии $E = U(x)$, являются для частицы точками поворота. Частица совершает колебательные движения между стенками потенциальной ямы внутри отрезка $[-a_0, a_0]$, выйти за пределы которого она не может. Амплитуда колебаний a_0 определяется выражением $a_0 = \sqrt{\frac{2E}{m_0\omega_0^2}}$.

В квантовой механике волновые функции и энергетический спектр гармонического осциллятора находятся из решения уравнения Шредингера

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2} \left(E - \frac{m_0\omega_0^2 x^2}{2} \right) \psi = 0, \quad -\infty < x < +\infty \quad (15)$$

Это уравнение имеет регулярные решения, обращающиеся в нуль на бесконечности, только при значениях полной энергии, равных

$$E_n = \hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (16)$$

$$n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Энергетический спектр гармонического осциллятора является дискретным и состоит из эквидистантных, т.е. отстоящих друг от друга на одинаковом энергетическом расстоянии (равном $\hbar\omega_0$) уровней. Наименьшее значение полной энергии, равное $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega_0$, называют нулевой энергией осциллятора.

Оно соответствует значению квантового числа $n = 0$ и, в соответствии с принципом неопределенностей, отлично от нуля.

Волновые функции, описывающие квантовые состояния осциллятора, в общем случае выражаются через специальные функции математической физики $H_n(\xi)$, которые называются полиномами Чебышева-Эрмита. Эти волновые функции имеют вид

$$\psi_n(\xi) = e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi) \quad (17)$$

где $\xi = \frac{x}{x_0}$, $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m_0 \omega_0}}$, а полином Чебышева-Эрмита n -го порядка $H_n(\xi)$

определяется выражением

$$H_n(\xi) = \frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} e^{\xi^2} \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n} \quad (18)$$

Нормированные волновые функции для первых трех энергетических уровней гармонического осциллятора имеют вид

$$\begin{aligned} n = 0, & \quad \psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{x_0 \sqrt{\pi}}} \exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right), \\ n = 1, & \quad \psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2x_0 \sqrt{\pi}}} \frac{2x}{x_0} \exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right), \\ n = 2, & \quad \psi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{8x_0 \sqrt{\pi}}} \left(\frac{4x^2}{x_0^2} - 2\right) \exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right). \end{aligned} \quad (19)$$

Графики этих волновых функций представлены на рис.6. Отрезок $[-a_0, a_0]$ определяет область, в которой совершал бы колебания классический осциллятор. Ширина этой области оказывается различной для разных значений квантового числа n , поскольку энергия осциллятора, а, следовательно, и амплитуда его колебаний также зависят от n .

§4. Потенциальный порог и потенциальный барьер

В предыдущих разделах было рассмотрено движение частицы в ограниченной области пространства, так называемое финитное движение. Перейдем теперь к анализу случаев, в которых частица, находящаяся в силовых полях, способна уходить на бесконечность, т.е. приступим к рассмотрению инфинитного движения частицы.

Движение частицы в области потенциального порога. Рассмотрим движение частицы в силовом поле, в котором ее потенциальная энергия $U(x)$ имеет вид

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 & \text{— область I} \\ U_0, & x > 0 & \text{— область II} \end{cases}$$

В этом случае говорят, что частица находится в области потенциального порога. На границе порога, т.е. при $x = 0$, потенциальная энергия частицы скачком меняется на конечную величину U_0 (рис.7). Будем для определенности считать, что частица движется слева направо, т.е. приближается к порогу со стороны отрицательных значений x .

Рассмотрим сначала случай, когда энергия частицы E меньше высоты потенциального порога U_0 , т.е. $E < U_0$. Такой порог называют высоким потенциальным порогом. Обозначим область слева от порога ($x < 0$) цифрой I и все решения для этой области будем отмечать индексом 1. Область справа от порога ($x > 0$) обозначим цифрой II, будем отмечать соответствующие ей решения цифрой 2.

Решение уравнения Шредингера (3) с учетом непрерывности волновых функций и их производных на границе порога имеет вид

$$\psi_1(x) = e^{ik_1x} + \frac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2} e^{-ik_1x}, \quad x < 0 \quad (20a)$$

$$\psi_2(x) = \frac{2k_1}{k_1 + ik_2} e^{-k_2x}, \quad x > 0 \quad (20b)$$

где

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2} E} \quad \text{и} \quad k_2 = \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2} (U_0 - E)}. \quad (21)$$

Отметим, что уравнение Шредингера в данном случае имеет решение при любых значениях коэффициентов k_1 и k_2 , т.е. при любых значениях энергии E . Это означает, что частица обладает непрерывным энергетическим спектром.

Волновые функции ψ_1 и ψ_2 (20а,б), описывающие состояние частицы в областях I и II, в случае высокого потенциального порога имеют существенно различный вид. Первое слагаемое в волновой функции ψ_1 представляет собой плоскую волну де Бройля, распространяющуюся вдоль оси x из $-\infty$ к области порога, т.е. слева направо. Аналогично, второе слагаемое в ψ_1 описывает плоскую дебройлевскую волну, распространяющуюся вдоль оси x в отрицательном направлении. Тогда как волновая функция $\psi_2(x)$, характеризующая движение частицы в области II, представляет собой затухающую вглубь порога экспоненту.

Введем коэффициент отражения R , характеризующий вероятность отражения частицы от потенциального порога, и коэффициент прохождения D , определяющий вероятность того, что частица преодолет потенциальный порог и удалится от него на бесконечно большое расстояние. Так как для потока частиц, падающих на барьер, коэффициент отражения R определяет относительную долю отраженных частиц, а коэффициент прохождения D – относительную долю частиц, преодолевших потенциальный порог, то R и D можно определить через отношение соответствующих потоков вероятности

$$R = \frac{|\vec{j}_{\text{отр}}|}{|\vec{j}_{\text{пад}}|}, \quad D = \frac{|\vec{j}_{\text{прош}}|}{|\vec{j}_{\text{пад}}|}, \quad (22)$$

где $\vec{j}_{\text{отр}}$, $\vec{j}_{\text{пад}}$ и $\vec{j}_{\text{прош}}$ - векторы плотности потока вероятности соответственно для падающей (первое слагаемое в (20а)), отраженной (второе слагаемое в (20а)) и проходящей (20б) волн. Напомним, что вектор плотности потока вероятности \vec{j} определяется через волновую функцию ψ следующим образом

$$j = \frac{i\hbar}{2m_0} [\psi \cdot \text{grad}\psi^* - \psi^* \cdot \text{grad}\psi]$$

С учетом вида волновых функций (20а,б) получаем

$$|j_{над}| = \frac{\hbar k_1}{m_0}, \quad |j_{отп}| = \frac{\hbar k_1}{m_0} \left| \frac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2} \right|^2, \quad |j_{под}| = 0.$$

Таким образом, в случае высокого порога коэффициент отражения $R = 1$, коэффициент прохождения $D = 0$ и тем самым выполняется условие $R + D = 1$.

Рассмотрим теперь случай низкого потенциального порога, когда энергия налетающей частицы E превышает высоту порога U_0 , т.е. $E > U_0$. Решая уравнение Шредингера, находим волновые функции для областей I и II

$$\psi_1(x) = e^{ik_1x} + \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} e^{-ik_1x} \quad (23a)$$

$$\psi_2(x) = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} e^{ik_2x} \quad (23б)$$

где k_1 и k_2 определены соотношениями

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2} E} \quad \text{и} \quad k_2 = \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2} (E - U_0)}.$$

Представленные волновые функции описывают падающую на порог волну де Бройля (первое слагаемое в (23а)), отраженную волну (второе слагаемое в (23а)) и волну, проходящую через порог (23б). Векторы плотности потока вероятности для этих трех волн имеют следующий вид

$$|j_{над}| = \frac{\hbar k_1}{m_0}, \quad |j_{отп}| = \frac{\hbar k_1}{m_0} \left| \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right|^2, \quad |j_{под}| = \frac{\hbar k_2}{m_0} \left| \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \right|^2.$$

Коэффициент отражения частицы от порога R и коэффициент прохождения частицы через порог D с учетом соотношений (22), (23) есть

$$R = \left| \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right|^2 = \left(\frac{1 - \sqrt{1 - U_0/E}}{1 + \sqrt{1 - U_0/E}} \right)^2$$

$$D = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2} = 4 \frac{\sqrt{1 - U_0/E}}{(1 + \sqrt{1 - U_0/E})^2}.$$

Таким образом, и в случае низкого порога выполняется соотношение $R + D = 1$, что естественно ожидать с точки зрения сложения вероятностей: падающая на порог частица либо отразится от него, либо пройдет в область II.

Отметим, что классическая частица не может отразиться от низкого порога, в области II меняется лишь ее кинетическая энергия. Квантовая частица, как показывает проведенное рассмотрение, с вероятностью, определяемой коэффициентом отражения R , может отразиться не только от высокого, но и от низкого порога. Физическая причина такого явления заключается в наличии у частицы волновых свойств, благодаря которым частица, как и обычная волна, испытывает отражение от любой неоднородности силового поля.

Прохождение частицы через потенциальный барьер. Потенциальным барьером называется область пространства, в которой потенциальная энергия частицы U больше, чем в окружающих областях. Рассмотрим простейший случай одномерного прямоугольного потенциального барьера (рис.8а), для которого потенциальная энергия частицы имеет вид

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 & \text{— область I} \\ U_0, & 0 < x < a & \text{— область II} \\ 0, & x > a & \text{— область III} \end{cases}$$

Будем считать, что частица приближается к барьеру со стороны отрицательных значений x , т.е. движется слева направо. Рассмотрим случай, когда энергия частицы E меньше высоты потенциального барьера U_0 , т.е. будем считать, что $E < U_0$ (случай $E > U_0$ рассмотрен в задаче 8 данного пособия).

Волновые функции, являющиеся решениями уравнения Шредингера (3), для данной задачи имеют вид

$$\psi_1(x) = e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x} \quad \text{— область I}$$

$$\psi_2(x) = A_2 e^{k_2 x} + B_2 e^{-k_2 x} \quad - \text{ область II} \quad (24)$$

$$\psi_3(x) = A_3 e^{ik_1 x} \quad - \text{ область III}$$

$$\text{где } k_1 = \sqrt{\frac{2m_0 E}{\hbar^2}} \quad \text{и} \quad k_2 = \sqrt{\frac{2m_0(U_0 - E)}{\hbar^2}}.$$

Основное внимание в данной задаче сосредоточим на анализе прохождения частицы через барьер. Условие непрерывности (условие сшивки) волновых функций и их производных на границах барьера, т.е. при $x = 0$ и $x = a$, позволяет найти коэффициенты B_1, A_2, B_2 и A_3 . В частности, для амплитуды A_3 получаем следующее выражение

$$A_3 = \frac{4ik_1 k_2 e^{ik_1 a}}{(k_1 + ik_2)^2 e^{k_2 a} - (k_1 - ik_2)^2 e^{-k_2 a}}.$$

Векторы плотности потока вероятности для падающей на барьер и прошедшей через него волн с учетом (24) имеют вид

$$|\vec{j}_{\text{над}}| = \frac{\hbar k_1}{m_0}, \quad |\vec{j}_{\text{прош}}| = \frac{\hbar k_1}{m_0} |A_3|^2$$

Подставляя $|\vec{j}_{\text{над}}|$ и $|\vec{j}_{\text{прош}}|$ в выражение для D (22), находим коэффициент прохождения частицы через барьер

$$D = \frac{|\vec{j}_{\text{прош}}|}{|\vec{j}_{\text{над}}|} = |A_3|^2 = \left[1 + \left(\frac{k_1^2 + k_2^2}{2k_1 k_2} \right)^2 \text{sh}^2 k_2 a \right]^{-1},$$

где гиперболический синус $\text{sh} k_2 a = \frac{1}{2} (e^{k_2 a} - e^{-k_2 a})$. В случае, когда ширина

барьера a удовлетворяет условию $k_2 a \gg 1$, $e^{-k_2 a} \ll 1$ и гиперболический синус

можно заменить экспонентой $shk_2 a \approx \frac{1}{2} e^{k_2 a}$. С учетом выражений для k_1 и k_2 коэффициент прохождения частицы через порог D принимает вид

$$D \approx D_0 \exp \left\{ -\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m_0(U_0 - E)} \right\}. \quad (25)$$

Здесь коэффициент $D_0 = 16 \frac{E}{U_0} \left(1 - \frac{E}{U_0} \right)$ является медленно изменяющейся функцией отношения $\frac{E}{U_0}$, численное значение которой по порядку величины сравнимо с единицей. Основной вклад в зависимость D от параметров задачи дает экспонента, поэтому в большинстве случаев при оценке коэффициента прохождения частицы через потенциальный барьер полагают $D_0 \approx 1$. При этом выражение для D принимает вид

$$D \approx \exp \left\{ -\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m_0(U_0 - E)} \right\} \quad (26)$$

Обобщение полученного результата на случай барьера произвольной формы приводит к следующему выражению для коэффициента прохождения D

$$D \approx \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m_0[U(x) - E]} dx \right\} \quad (27)$$

где x_1 и x_2 - значения координат, при которых $U(x) = E$ (рис.8б).

Прохождение частицы через потенциальный барьер, высота которого превышает энергию частицы, получило название *туннельного эффекта*. Отметим, что туннельный эффект представляет собой чисто квантовое явление. Классическая частица, подходя к барьеру, высота которого больше ее полной энергии, отражается от него. Пройти через такой барьер она не может. Квантовая

частица может пройти через этот потенциальный барьер, причем вероятность ее прохождения испытывает сильную зависимость от массы частицы m_0 , ее энергии, а также от вида потенциального барьера $U(x)$.

Туннельный эффект объясняет ряд важных физических явлений, таких, например, как холодная эмиссия электронов из металлов, радиоактивный α – распад ядер, контактную разность потенциалов и т.д. Кроме того, туннельный эффект находит очень широкое применение в технических приложениях. В частности, на его основе был создан сканирующий туннельный микроскоп, который произвел подлинную революцию в физике и технике поверхности и имеет широкие перспективы в связи с развитием нанотехнологий.

§5. Примеры решения задач

Задача 1. Частица находится в одномерной прямоугольной потенциальной яме с непроницаемыми стенками. Найдите отношение разности энергий двух соседних энергетических уровней к полной энергии частицы в следующих случаях: 1) $n = 3$, 2) $n = 10$, 3) $n = 100$, 4) $n \rightarrow \infty$.

Решение: Используя соотношение (6), находим разность энергий частицы для $n + 1$ -го и n -го энергетических уровней. Эта разность определяется выражением

$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_0 a^2} (2n + 1).$$

Поэтому искомое отношение есть

$$\varepsilon = \frac{\Delta E}{E_n} = \frac{2n + 1}{n^2}.$$

Проанализируем, как зависит величина ε от значения квантового числа n . Расчет дает $\varepsilon = 0,77$ для $n = 3$, $\varepsilon = 0,21$ для $n = 10$ и $\varepsilon = 0,02$ для $n = 100$. Следовательно, искомое отношение ε уменьшается с увеличением значения квантового числа n и стремится к нулю при $n \rightarrow \infty$.

Полученный результат означает, что с увеличением n , т.е. с увеличением энергии частицы, дискретность энергетических уровней становится менее существенной, поскольку с ростом n энергетическое расстояние между соседними уровнями уменьшается и при больших значениях n становится пренебрежимо малым по сравнению с энергией частицы. Это означает, что энергетический спектр частицы в этих условиях можно считать практически непрерывным спектром, как и у классической частицы. Поэтому случай больших значений квантового числа n называют квазиклассическим, т.е. почти классическим случаем.

Задача 2. Частица массы m_0 находится в двумерной квадратной потенциальной яме с абсолютно непроницаемыми стенками во втором возбужденном состоянии. Найдите вероятность обнаружения частицы в области $0 < x \leq \frac{a}{3}$, $0 < y \leq \frac{a}{3}$, где a - сторона ямы, а также разность энергий второго и первого возбужденных состояний.

Решение: Волновая функция частицы, находящейся в двумерной квадратной потенциальной яме имеет вид

$$\Psi_{n_1, n_2}(x, y) = \frac{2}{a} \sin \frac{\pi n_1 x}{a} \sin \frac{\pi n_2 y}{a},$$

а ее энергетический спектр описывается выражением (10)

$$E_{n_1, n_2} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_0 a^2} (n_1^2 + n_2^2),$$

где квантовые числа $n_1, n_2 = 1, 2, 3, \dots$. Первому возбужденному состоянию частицы отвечают квантовые числа $n_1 = 1, n_2 = 2$ (или, наоборот, $n_1 = 2, n_2 = 1$). Следовательно, соответствующий ему энергетический уровень оказывается двукратно вырожденным. Второму возбужденному состоянию соответствуют квантовые числа $n_1 = n_2 = 2$, соответствующий ему энергетический уровень невырожден.

Вероятность обнаружить частицу в области $0 < x \leq \frac{a}{3}$, $0 < y \leq \frac{a}{3}$ определяется выражением

$$P = \int_0^{a/3} \int_0^{a/3} |\Psi_{2,2}(x, y)|^2 dx dy = \frac{4}{a^2} \int_0^{a/3} \int_0^{a/3} \sin^2 \frac{2\pi x}{a} \sin^2 \frac{2\pi y}{a} dx dy = \left(\frac{1}{3} - \frac{\sqrt{3}}{8\pi} \right)^2 \approx 0,07.$$

Разность энергий второго и первого возбужденных состояний частицы равна

$$\Delta E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_0 a^2} [(2^2 + 2^2) - (2^2 + 1^2)] = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_0 a^2} (8 - 5) = \frac{3}{2} \frac{\pi^2 \hbar^2}{m_0 a^2}.$$

Задача 3. Частица массы m_0 находится в трехмерной кубической потенциальной яме с абсолютно непроницаемыми стенками. Сторона куба равна a . Найдите: а) разность энергий 6-го и 5-го уровней; б) энергию 6-го уровня; в) кратность вырождения 6-го уровня.

Решение: Состояние частицы, находящейся в трехмерной кубической потенциальной яме с абсолютно непроницаемыми стенками, описывается волновой функцией

$$\Psi_{n_1, n_2, n_3}(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{a^3}} \sin \frac{\pi n_1 x}{a} \sin \frac{\pi n_2 y}{a} \sin \frac{\pi n_3 z}{a},$$

а энергия частицы, согласно (13), может принимать значения

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_0 a^2} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2),$$

где квантовые числа $n_1, n_2, n_3 = 1, 2, 3, \dots$. Основному состоянию частицы, т.е. состоянию с наименьшей энергией, отвечают квантовые числа $n_1 = n_2 = n_3 = 1$.

Энергетические уровни возбужденных состояний определяются приведенным выражением для E_{n_1, n_2, n_3} при последовательном увеличении суммы квадратов квантовых чисел $\sum_{i=1}^3 n_i^2$ (см. таблицу).

Номер уровня	Квантовые числа (n_1, n_2, n_3)	$\sum_{i=1}^3 n_i^2$
1	(1,1,1)	3
2	(1,1,2), (1,2,1), (2,1,1)	6
3	(1,2,2), (2,1,2), (2,2,1)	9
4	(1,1,3), (1,3,1), (3,1,1)	11
5	(2,2,2)	12
6	(1,2,3), (1,3,2), (2,1,3), (2,3,1), (3,1,2), (3,2,1)	14

Как следует из таблицы, шестому энергетическому уровню соответствует сумма квадратов квантовых чисел, равная четырнадцати, тогда как для пятого уровня эта сумма равна двенадцати. Таким образом, разность энергий шестого и пятого уровней составляет

$$\Delta E = E_6 - E_5 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_0 a^2} (14 - 12) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{m_0 a^2}.$$

Для энергии шестого уровня получаем

$$E_6 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_0 a^2} \cdot 14 = 7 \frac{\pi^2 \hbar^2}{m_0 a^2}.$$

Обсудим теперь вопрос о кратности вырождения энергетических уровней частицы, находящейся в трехмерной кубической яме. Если квантовые числа n_1 , n_2 и n_3 равны между собой, то соответствующий энергетический уровень оказывается невырожденным. Таковы, например, энергетические уровни, отвечающие набору квантовых чисел (1,1,1), (2,2,2) и т.д. Если два из трех

квантовых чисел равны между собой, но не равны третьему квантовому числу, то соответствующий энергетический уровень имеет кратность вырождения, равную трем. В частности, трехкратно вырожденными являются второй, третий и четвертый энергетические уровни. И, наконец, если квантовые числа не равны между собой, т.е. если $n_1 \neq n_2 \neq n_3$, то кратность вырождения определяется числом возможных перестановок из трех чисел, т.е. равна шести. Именно эта ситуация реализуется для шестого энергетического уровня. Таким образом, кратность вырождения шестого уровня $K_6 = 6$.

Задача 4. Гармонический осциллятор находится в основном состоянии. Найдите вероятность обнаружения частицы вне пределов классической области, т.е. вне области $x_0 \leq x \leq x_0$, где x_0 - амплитуда классических колебаний.

Решение: Поскольку осциллятор находится в основном состоянии, то, согласно (16), (19) его энергия равна $E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega_0$, а волновая функция,

описывающая его состояние, имеет вид $\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{x_0} \sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right)$, где

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m_0}} - \text{частота классического гармонического осциллятора, а } x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m_0 \omega_0}}.$$

При максимальном отклонении классического осциллятора от положения равновесия его полная энергия должна быть равна потенциальной энергии, т.е.

$$\frac{k a_0^2}{2} = \frac{\hbar \omega_0}{2}.$$

Отсюда следует, что амплитуда классических колебаний $a_0 = \sqrt{\frac{\hbar \omega_0}{k}} = \sqrt{\frac{\hbar}{m_0 \omega_0}}$.

Найдем вероятность обнаружения частицы в классической области

$$P_{кл.} = \int_{-a_0}^{a_0} |\psi_0(x)|^2 dx = \frac{1}{x_0 \sqrt{\pi}} \int_{-a_0}^{a_0} e^{-\frac{x^2}{x_0^2}} dx = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-1}^1 e^{-y^2} dy,$$

где $y = \frac{x}{x_0}$. Поскольку под интегралом стоит четная функция переменной y , то

$$P_{\text{кл.}} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^1 e^{-y^2} dy.$$

Интеграл

$$I(t) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^t e^{-y^2} dy$$

называется *интегралом вероятностей*. Этот интеграл широко используется в теории вероятностей, статистике, теоретической и математической физике, его значения для различных пределов интегрирования t приведены в таблицах. В данном случае, при $t = 1$ $I(1) = 0,8427$, следовательно

$$P_{\text{кл.}} = 0,8427 \approx 0,84.$$

Соответственно, вероятность P того, что частица будет обнаружена вне классической области, равна

$$P = 1 - P_{\text{кл.}} \approx 0,16$$

Таким образом, вероятность пребывания гармонического осциллятора, находящегося в основном состоянии, вне пределов классической области составляет $\sim 16\%$, т.е. имеет заметную величину.

Задача 5. Частица массы m_0 движется в трехмерном потенциальном поле

$$U(x, y, z) = \frac{k}{2}(x^2 + y^2 + z^2),$$

где k - постоянная (трехмерный гармонический осциллятор). Найдите собственные значения энергии частицы и кратность вырождения n -го энергетического уровня.

Решение: Поскольку движение частицы вдоль осей x , y и z происходит независимо, то будем искать волновую функцию в виде произведения

$$\psi(x, y, z) = \psi_1(x) \cdot \psi_2(y) \cdot \psi_3(z),$$

где ψ_1 зависит только от координаты x , ψ_2 - только от y и ψ_3 - только от z .

Подставляя $\psi(x, y, z)$ в уравнение Шредингера (4), получаем

$$\begin{aligned} \psi_2(y) \cdot \psi_3(z) \cdot \frac{d^2 \psi_1(x)}{dx^2} + \psi_1(x) \cdot \psi_3(z) \frac{d^2 \psi_2(y)}{dy^2} + \psi_1(x) \cdot \psi_2(y) \cdot \frac{d^2 \psi_3(z)}{dz^2} + \\ + \frac{2m_0}{\hbar^2} [E - U(x, y, z)] \psi_1(x) \cdot \psi_2(y) \cdot \psi_3(z) = 0. \end{aligned}$$

Разделив это уравнение на $\psi(x, y, z)$ и используя данный в условии задачи вид зависимости $U(x, y, z)$, приходим к соотношению

$$\begin{aligned} \left[\frac{1}{\psi_1(x)} \cdot \frac{d^2 \psi_1(x)}{dx^2} - \frac{2m_0}{\hbar^2} \cdot \frac{kx^2}{2} \right] + \left[\frac{1}{\psi_2(y)} \cdot \frac{d^2 \psi_2(y)}{dy^2} - \frac{2m_0}{\hbar^2} \cdot \frac{ky^2}{2} \right] + \\ + \left[\frac{1}{\psi_3(z)} \cdot \frac{d^2 \psi_3(z)}{dz^2} - \frac{2m_0}{\hbar^2} \cdot \frac{kz^2}{2} \right] = -\frac{2m_0}{\hbar^2} E. \end{aligned}$$

Первое выражение в квадратных скобках в левой части этого равенства является функцией только координаты x , второе выражение в квадратных скобках является функцией только координаты y , третье – функцией только координаты z . Поскольку их сумма равна постоянной величине, то каждое из этих слагаемых также должно равняться постоянной величине

$$\begin{aligned} \frac{1}{\psi_1(x)} \cdot \frac{d^2 \psi_1(x)}{dx^2} - \frac{2m_0}{\hbar^2} \cdot \frac{kx^2}{2} &= -\frac{2m_0}{\hbar^2} E_1 \\ \frac{1}{\psi_2(y)} \cdot \frac{d^2 \psi_2(y)}{dy^2} - \frac{2m_0}{\hbar^2} \cdot \frac{ky^2}{2} &= -\frac{2m_0}{\hbar^2} E_2 \\ \frac{1}{\psi_3(z)} \cdot \frac{d^2 \psi_3(z)}{dz^2} - \frac{2m_0}{\hbar^2} \cdot \frac{kz^2}{2} &= -\frac{2m_0}{\hbar^2} E_3, \end{aligned}$$

где константы E_1, E_2, E_3 имеют размерность энергии, и удовлетворяют условию $E_1 + E_2 + E_3 = E$. Таким образом, получаем три уравнения для одномерного гармонического осциллятора, решения которых нам уже известны (см. (16), (17)).

Волновая функция трехмерного гармонического осциллятора представляет собой произведение трех волновых функций для одномерного гармонического осциллятора (17) и зависит от трех квантовых чисел n_1, n_2 и n_3

$$\Psi_{n_1, n_2, n_3}(x, y, z) = \Psi_{n_1}(x) \cdot \Psi_{n_2}(y) \cdot \Psi_{n_3}(z)$$

$$n_1, n_2, n_3 = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Для энергии трехмерного гармонического осциллятора получаем следующее выражение

$$E_n = \hbar\omega_0 \left(n + \frac{3}{2} \right),$$

где $n = n_1 + n_2 + n_3$, $n = 0, 1, 2, 3, \dots$

Найдем кратность вырождения n -го энергетического уровня трехмерного гармонического осциллятора. Для заданного значения n кратность вырождения уровня равна числу возможных перестановок трех чисел n_1, n_2 и n_3 , сумма которых равна n . Найдем сначала число перестановок при фиксированном значении n_1 . Оно, как легко видеть, равно числу возможных значений n_2 (или, что то же самое, n_3). Число n_2 при заданном n_1 может меняться в пределах от 0 до $n - n_1$, т.е. принимает $n - n_1 + 1$ значение. Следовательно, число перестановок при фиксированном n_1 равно $n - n_1 + 1$. Суммируя это выражение по n_1 , находим кратность вырождения n -го уровня K_n

$$K_n = \sum_{n_1=0}^n (n - n_1 + 1) = \frac{(n+1)(n+2)}{2}.$$

Основное состояние трехмерного гармонического осциллятора ($n = 0$) оказывается невырожденным, $K_0 = 1$. Первое возбужденное состояние ($n = 1$) имеет кратность вырождения $K_1 = 3$, ему соответствуют тройки квантовых чисел (100), (010), (001).

Задача 6. Частица массы m_0 падает слева на прямоугольный потенциальный порог высоты U_0 . Энергия частицы равна E , причем $E < U_0$. Найдите эффективную глубину $x_{эфф.}$ проникновения частицы в область порога.

Вычислите $x_{эфф.}$ для электрона, если $U_0 - E = 1$ эВ.

Решение: Поскольку, согласно условию задачи, энергия частицы E меньше высоты порога U_0 , то мы имеем дело с высоким потенциальным порогом (рис.7)

. В этом случае, как уже отмечалось выше, хотя коэффициент отражения частицы от порога равен единице, тем не менее существует вероятность обнаружить частицу в области за порогом, т.е. при $x > 0$. Плотность вероятности нахождения частицы в области за порогом имеет вид

$$w_2(x) = \frac{dP}{dx} = |\psi_2(x)|^2 = \left| \frac{2k_1}{k_1 + ik_2} \right|^2 e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m_0(U_0-E)}x} = \frac{4k_1^2}{k_1^2 - k_2^2} e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m_0(U_0-E)}x},$$

где k_1 и k_2 определяются выражениями (21). Эффективная глубина проникновения частицы $x_{эфф.}$ в область потенциального порога определяется как расстояние от границы порога, на котором плотность вероятности обнаружения частицы уменьшается в $e = 2,718$ раз. Из этого определения следует, что

$$\frac{w_2(x_{эфф.})}{w_2(0)} = \exp\left\{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m_0(U_0-E)}x_{эфф.}\right\} = e^{-1}.$$

Таким образом,

$$\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m_0(U_0-E)}x_{эфф.} = 1.$$

Отсюда находим, что

$$x_{\text{эфф.}} = \frac{\hbar}{2\sqrt{2m_0(U_0 - E)}}.$$

В случае электрона, налетающего на потенциальный порог, для которого $U_0 - E = 1$ эВ, получаем

$$x_{\text{эфф.}} = \frac{1,05 \cdot 10^{-34}}{2\sqrt{2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}}} \approx 10^{-10} \text{ м} = 0,1 \text{ нм}$$

Результаты расчетов показывают, что электрон с заметной вероятностью может проникать в область высокого порога лишь на расстояния, сравнимые с размером атома.

Интересно отметить, что рассмотренное явление проникновения частицы в область высокого порога имеет аналог в классической физике – явление полного внутреннего отражения в волновой оптике. В этом случае также происходит полное отражение при падении света на границу раздела оптически более плотной и оптически менее плотной сред. При этом свет может проникать в оптически менее плотную среду, однако его амплитуда, как и волновая функция частицы в данной задаче, убывает с глубиной по экспоненциальному закону.

Задача 7. Найдите коэффициент прохождения частицы массой m_0 через треугольный потенциальный барьер вида

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ U_0 \left(1 - \frac{x}{a}\right), & 0 < x < a \\ 0, & x > a \end{cases}$$

в зависимости от энергии частицы E при $E < U_0$ (рис.9).

Решение: Согласно (27), коэффициент прохождения частицы через высокий барьер D , определяющий вероятность туннелирования частицы, имеет вид

$$D \approx \exp \left\{ -\frac{2\sqrt{2m_0}}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{[U(x) - E]} dx \right\},$$

где x_1 и x_2 - значения координат, при которых $U(x) = E$. В данном случае интеграл, стоящий под знаком экспоненты, есть

$$I = \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{[U(x) - E]} dx = \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{U_0 \left(1 - \frac{x}{a}\right) - E} dx,$$

где $x_1 = 0$, а $x_2 = a \left(1 - \frac{E}{U_0}\right)$. Производя замену переменной $z = U_0 \left(1 - \frac{x}{a}\right) - E$,

получаем

$$I = \frac{a}{U_0} \int_0^{U_0 - E} \sqrt{z} dz = \frac{2}{3} \frac{a}{U_0} (U_0 - E)^{3/2}.$$

Таким образом, коэффициент прохождения частицы через барьер D имеет следующий вид

$$D \approx \exp \left\{ -\frac{4\sqrt{2}}{3} \frac{\sqrt{m_0} a}{\hbar U_0} (U_0 - E)^{3/2} \right\}.$$

Отметим, что прохождение частиц через потенциальный барьер, близкий по форме к треугольному барьеру рассматриваемого вида, имеет место на практике, в частности, при холодной эмиссии электронов с поверхности металлов.

Задача 8. Частица массы m_0 падает на прямоугольный потенциальный барьер высоты U_0 и ширины a . Энергия частицы $E > U_0$. Найдите: а) коэффициент прозрачности барьера D ; б) значения энергии частицы, при которых она будет беспрепятственно проходить через такой барьер.

Решение: Обозначим цифрой I область $x < 0$, цифрой II область $0 < x < a$ и цифрой III область $x > a$. Решения уравнения Шредингера в этих трех областях имеют вид

$$\begin{aligned}\psi_1 &= e^{ik_1x} + B_1e^{-ik_1x} && \text{- область I} \\ \psi_2 &= A_2e^{ik_2x} + B_2e^{-ik_2x} && \text{- область II} \\ \psi_3 &= A_3e^{ik_1x} && \text{- область III,}\end{aligned}$$

где $k_1 = \sqrt{\frac{2m_0E}{\hbar^2}}$, $k_2 = \sqrt{\frac{2m_0(E-U_0)}{\hbar^2}}$.

Условие непрерывности волновых функций и их производных на границах барьера (при $x = 0$ и $x = a$) приводят к следующей системе уравнений

$$\begin{aligned}1 + B_1 &= A_2 + B_2 \\ ik_1 - ik_1B_1 &= ik_2A_2 - ik_2B_2 \\ A_2e^{ik_2a} + B_2e^{-ik_2a} &= A_3e^{ik_1a} \\ ik_2A_2e^{ik_2a} - ik_2B_2e^{-ik_2a} &= ik_1A_3e^{ik_1a}.\end{aligned}$$

Решая эту систему, находим амплитуду прошедшей волны

$$A_3 = \frac{4k_1k_2e^{-ik_1a}}{(k_1 + k_2)^2 e^{ik_2a} - (k_1 - k_2)^2 e^{-ik_2a}}.$$

Коэффициент прохождения частицы над потенциальным порогом D выражается через векторы плотности потока вероятности для падающей и прошедшей волн

$$D = \frac{|\vec{j}_{\text{прош}}|}{|\vec{j}_{\text{над}}|}.$$

В данном случае $|\vec{j}_{\text{прош}}| = \frac{\hbar k_1}{m_0} |A_3|^2$, $|\vec{j}_{\text{над}}| = \frac{\hbar k_1}{m_0}$, следовательно

$$D = |A_3|^2 = \left| \frac{4k_1 k_2 e^{-ik_1 a}}{(k_1 + k_2)^2 e^{ik_2 a} - (k_1 - k_2)^2 e^{-ik_2 a}} \right|^2.$$

Подставляя сюда выражения для k_1 и k_2 , получаем

$$D = \left[1 + \frac{U_0^2 \sin^2 k_2 a}{4E(E - U_0)} \right]^{-1}.$$

Коэффициент прохождения D обращается в единицу при $\sin k_2 a = 0$, т.е. при

$$\sqrt{\frac{2m_0(E - U_0)}{\hbar^2}} a = \pi n.$$

Таким образом, значения энергии частицы, при которых $D = 1$, равны

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_0 a^2} n^2 + U_0,$$

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

Следует подчеркнуть, что хотя значение $n = 0$ формально и удовлетворяет условию $\sin k_2 a = 0$, но при $n = 0$ коэффициент прохождения D не будет равен единице. Дело в том, что при $n = 0$ энергия частицы $E = U_0$, т.е. $(E - U_0) = 0$ и параметр k_2 также равен нулю. Это означает, что числитель и знаменатель дроби в выражении для D равны нулю. Избавляясь от неопределенности, находим, что коэффициент прохождения при $n = 0$ оказывается равным

$$D = \left(1 + \frac{m_0 a^2 U_0}{2\hbar^2} \right)^{-1}.$$

Отметим, что аналогичным образом решается задача о движении частицы над прямоугольной потенциальной ямой конечной глубины.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Иродов И.Е. Задачи по общей физике. М.: ЗАО “Издательство БИНОМ”, 1998. 448 с.
2. Иродов И.Е. Задачи по квантовой физике. М.: Высш. шк., 1991. 175 с.
3. Чертов А.Г., Воробьев А.А. Задачи по физике. М.: Высш. шк., 1988. 527 с.
4. Мартинсон Л.К. Методические указания к решению задач по курсу общей физики. Разделы “Элементы квантовой механики”, “Физика твердого тела”. М.: МВТУ им. Н.Э. Баумана, 1983. 64 с.

ОГЛАВЛЕНИЕ

1. Уравнение Шредингера для стационарных состояний	2
2. Частица в потенциальной яме с непроницаемыми стенками	3
3. Квантовый гармонический осциллятор	7
4. Потенциальный порог и потенциальный барьер	9
5. Примеры решения задач	14
Список литературы	24