

Глава 3

16. Частные случаи решения уравнения Шредингера

Ранее было показано, что решение полного уравнения Шредингера распадается на решение временного и координатного уравнений. Волновая функция, удовлетворяющая временному уравнению, инвариантна для всех квантово-механических задач. Это означает, что временное уравнение достаточно решить один раз. Координатное уравнение необходимо решать каждый раз, если изменяется вид потенциальной функции. Итак, в ниже рассматриваемых задачах мы будем решать лишь координатное уравнение Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + U\Psi = E\Psi. \quad (16.1)$$

16.1. Движение свободной частицы

Частица называется свободной, если на нее не действуют внешние силы. Это означает, что её потенциальная функция $U = 0$ и тогда уравнение (16.1) принимает вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi = E\Psi. \quad (16.2)$$

Будем рассматривать одномерное движение вдоль оси Ox . Перепишем уравнение так:

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\Psi = 0. \quad (16.3)$$

Введем обозначение: $\frac{2mE}{\hbar^2} = k^2$, тогда уравнение (16.3) примет вид:

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + k^2\Psi = 0. \quad (16.4)$$

Величина k называется волновым числом. Это название связано с тем, что коэффициент k непосредственно связан с длиной волны де-Бройля:

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{p^2}{\hbar^2}, \text{ или } p = \hbar k.$$

А это есть одно из уравнений де-Бройля, которое можно выразить через длину волны де-Бройля и волновое число:

$$p = \frac{h}{2\lambda} k \rightarrow \frac{h}{p} = \frac{2p}{k} \rightarrow \lambda = \frac{2p}{k} \rightarrow k = \frac{2p}{\lambda}.$$

Решением уравнения (16.4) является функция вида:

$$\Psi(x) = A_1 \cdot e^{ikx} + A_2 \cdot e^{-ikx}. \quad (16.5)$$

Это легко проверить прямой подстановкой (16.5) в уравнение (16.4). Первое слагаемое определяет движение частицы в положительном направлении оси Ox , второе слагаемое - движение в противоположном направлении.

Объединяя (16.5) с решением временного уравнения, полное решение уравнения Шредингера для свободной частицы получаем в виде:

$$\Psi(x, t) = A e^{-i(\omega t - kx)} = A e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - p_x x)}$$

Мы взяли лишь решение для удаляющейся волны в направлении оси Ox , кроме того, мы использовали формулы де-Бройля $p_x = \hbar k$ и $E = \hbar \omega$.

Если составить (равенство)

$$|\Psi(x, t)|^2 = C^2,$$

то получаем одинаковую плотность вероятности обнаружить свободную частицу в любом месте бесконечного пространства, что согласуется с определением плоской волны. Этот результат не противоречит и соотношению неопределенностей Гейзенберга

$$\Delta x \cdot \Delta p_x = \hbar,$$

так как для свободной частицы точно известна её энергия, а, следовательно, и импульс: $\Delta p_x = 0$, а потому имеется полная неопределенность местоположения. Данный пример еще раз свидетельствует о принципиальном различии в подходе к определению понятия “элементарная частица” в классической и квантовой механике. Полученный результат есть прямое следствие корпускулярно-волнового дуализма в свойствах элементарных частиц.

16.2. Частица в бесконечно глубокой потенциальной яме

Потенциальной ямой называется область пространства, в котором может перемещаться частица. Для того, чтобы покинуть эту область, частице должна быть сообщена добавочная энергия. Если потенциальная яма бесконечно глубокая (или её стенки бесконечно высокие), то частица никогда не сможет покинуть эту яму. Внутри потенциальной ямы частица движется как свободная частица, так как там она обладает только кинетической энергией.

В физических задачах стенки потенциальной ямы “создаются” теми силами, которые удерживают частицу в яме. Например, электроны в атоме удерживаются кулоновским полем ядра, электроны атома находятся в потенциальной яме, которую с достаточным приближением можно считать бесконечно глубокой. Подобная потенциальная яма возникает внутри металлов благодаря кулоновскому полю положительно заряженных ионов. И только отдельным электронам, в силу флуктуационных процессов получивших добавочную энергию, удастся покинуть область металла (холодная или термоэмиссия). Понятие потенциальной ямы работает и в других физических задачах: при рассмотрении контактной разности потенциалов, построении теории α -радиоактивного распада и т.д. Будем решать задачу в системе отсчета “Потенциальная яма”. Сделаем рисунок Для аналитического решения воспользуемся координатным уравнением Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + U\Psi = E\Psi. \quad (16.6)$$

Упростим далее задачу и будем рассматривать одномерный случай. Еще раз отметим, что внутри ямы частица движется как свободная, так как на неё внутри ямы не действуют внешние силы, потенциальная энергия частицы равна нулю $U = 0$. Уравнение (16.6) принимает вид:

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\Psi = 0. \quad (16.7)$$

Введем обозначение:

$$\frac{2m}{\hbar^2}E = k^2,$$

где коэффициент k имеет тот же смысл, что и при рассмотрении движения свободной частицы - волновое число. Уравнение (16.7) принимает вид:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + k^2 \Psi = 0. \quad (16.8)$$

Решением уравнения (16.8), с которым мы имели дело в предыдущей задаче о движении свободной частицы, является функция вида:

$$\Psi = A \sin kx + B \cos kx, \quad (16.9)$$

что легко проверить прямой подстановкой. Сделаем это для одной части решения. Составим члены уравнения (16.8):

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = -Bk \sin kx; \quad \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -Bk^2 \cos kx.$$

Составим уравнение (16.8):

$$-Bk^2 \cos kx + k^2 B \cos kx = 0 \text{ или } 0=0.$$

Мы получили тождество, следовательно, найденное нами решение (16.9) действительно удовлетворяет исходному уравнению (16.8). Так как уравнение Шредингера является дифференциальным уравнением второго порядка, то его решение (16.9) должно содержать две постоянные интегрирования. Решение в форме (16.9) записано с учетом принципа суперпозиции. Оно составлено из двух решений исходного уравнения.

Отметим еще раз: частица движется как свободная частица лишь в пределах потенциальной ямы, от стенки до стенки. Теперь учтем наличие стенок потенциальной ямы. По условию задачи стенки бесконечно высокие (или яма бесконечно глубокая), поэтому за пределами ямы частица находится не может, вероятность ее обнаружения вне ямы равна нулю. Математически это можно записать так:

$$\Psi(x) = 0 \text{ при } x \leq 0, \quad x \geq a. \quad (16.10)$$

Воспользуемся этими граничными условиями, чтобы определить постоянные интегрирования A и B в решении (16.9). Пусть $x=0$, тогда

$$\Psi(0) = 0 = A \sin(k \cdot 0) + B \cos(k \cdot 0). \quad (16.11)$$

Так как первое слагаемое автоматически равно нулю, то для выполнения граничного условия $\Psi(0) = 0$ необходимо, чтобы второе слагаемое в (16.11) равнялось нулю. А так как $\cos(k \cdot 0) = 1$, то коэффициент B должен равняться нулю: $B=0$. Таким образом, решение задачи принимает вид: $\Psi(x) = A \sin kx$.

Воспользуемся вторым граничным условием: $\Psi(a) = 0$, или $\Psi(a) = A \sin ka = 0$. Откуда следует, что, так как $A \neq 0$, $\sin ka = 0$. Из

курса элементарной математики следует, что это возможно, если аргумент синуса принимает следующие значения:

$$ka = n\pi, \quad (16.12)$$

где число $n = 1, 2, 3, \dots$ (о значении $n = 0$ поговорим отдельно).

Учитывая, что коэффициент k связан с энергией частицы соотношением $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$, получаем важное соотношение для энергии частицы, движущейся в бесконечно глубокой потенциальной яме:

$$E_n = \frac{n^2 p^2 \hbar^2}{2ma^2}. \quad (16.13)$$

Решение данной задачи имеет принципиальное значение для квантовой механики. Если в теории Н. Бора квантование энергии в состоянии электрона в атоме принималось как постулат, то полученное решение утверждает квантование энергетического состояния частицы в потенциальной яме как естественное следствие самой квантовой механики, ее фундаментального положения о корпускулярно-волновых свойствах элементарных частиц.

Возвратимся к квантовому числу n и обсудим, почему оно не может принимать значение, равное нулю. Действительно, при $n=0$ и энергия частицы $E=0$. Но внутри потенциальной ямы частица является свободной и обладает только кинетической энергией. Знание точного значения энергии определяет точное значение и импульса, он тоже равен нулю. Но тогда на основании соотношения Гейзенберга $\Delta x \Delta p_x = h$ для величины Δx мы получаем бесконечно большое значение. Это противоречит условию задачи: ширина потенциальной ямы, в пределах которой может двигаться частица, конечна. Все это запрещает квантовому числу n принимать значение, равное нулю.

Воспользуемся условием нормировки, которое утверждает, что частица с достоверностью, равной единице, обязательно находится где-то в области изменения ее координат:

$$\int |\Psi|^2 dx = 1.$$

В нашей задаче частица движется в пределах потенциальной ямы, от стенки с координатой $x=0$ до стенки с координатой $x=a$, поэтому условие нормировки запишется так:

$$\int_0^a |\Psi|^2 dx = \int_0^a A^2 \sin^2 kx \cdot dx = A^2 \int_0^a \sin^2 kx \cdot dx = A^2 \cdot \frac{a}{2} = 1,$$

откуда

$$A = \sqrt{\frac{2}{a}}. \quad (16.14)$$

Таким образом, окончательное решение задачи о движении частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме имеет вид:

$$\Psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cdot \sin kx = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi}{a} \cdot x. \quad (16.15)$$

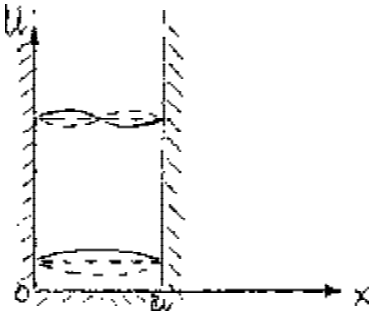


Рис. 3

При $n=1$ функция (16.15) определяет наименьшее энергетическое состояние частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме. При этом на стенках потенциальной ямы волновая функция равна нулю. Говорят, что на стенках потенциальной ямы образуются узлы волновой функции, внутри же ямы при $n=1$ функция состояния (16.15) узлов не имеет. Это является общим характерным свойством основных состояний всех квантово-механических задач.

17. Квантовый гармонический осциллятор

Вспомним основные определения, связанные с физическим объектом – гармоническим осциллятором (ГО). ГО называется материальная точка, совершающая малые колебания около положения равновесия под действием гармонической силы. Колебания считаются малыми, если изменение потенциальной энергии при наибольшем отклонении составляют малую часть потенциальной энергии ГО в исходном состоянии. Сила, действующая на ГО, называется гармонической, если она изменяется по закону синуса или косинуса. Если движение ГО подчиняется классическим законам, то такой ГО называется классическим; если же законы движения имеют квантовый характер – то мы имеем дело с квантовым гармоническим осциллятором (КГО). Если движение КГО одномерное, то КГО называют

еще дополнительно линейным. Мы будем рассматривать только одномерное движение, поэтому эпитет “линейный” будем опускать.

Поскольку КГО будет подвержен действию внешней силы, то он будет обладать потенциальной энергией. Поэтому в данной задаче нам необходимо решить полное координатное уравнение Шредингера. По сравнению с предыдущими задачами, мы должны включить в уравнение и оператор потенциальной энергии. Таким образом, нам необходимо решить уравнение вида:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + U\Psi = E\Psi, \quad (17.1)$$

или

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\Psi = 0. \quad (17.2).$$

Введем обозначение:

$$\frac{2m}{\hbar^2}(E - U) = k^2, \quad (17.3)$$

тогда уравнение (17.2) запишется так:

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + k^2\Psi = 0. \quad (17.4)$$

Несмотря на внешнее подобие этого уравнения с уравнениями движения свободной частицы и движения частицы внутри бесконечно глубокой потенциальной ямы, у него есть принципиальное отличие: в тех задачах коэффициент k был постоянной величиной, из соотношения (17.3) видно, что в данной задаче этот коэффициент является функцией координаты частицы (от этой величины зависит значение потенциальной функции $U(x)$). Так как потенциальная функция зависит только от координаты частицы, то, согласно сформулированному ранее правилу нахождения оператора функции от координат и проекций импульса, в данном случае оператор потенциальной функции $\mathcal{U}(x)$ совпадает с самой функцией $U(x)$. Воспользуемся значением потенциальной энергии классического гармонического осциллятора:

$$U(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2}. \quad (17.5)$$

Напомним вывод этого соотношения:

$$F = -\frac{dU}{dx} \Rightarrow U(x) = -\int F dx = -\int (-kx) dx = \frac{kx^2}{2}.$$

Коэффициент k определим из уравнения движения классического осциллятора:

$$ma = F = -kx \Rightarrow \frac{d^2x}{dt^2} + \frac{k}{m}x = 0 \Rightarrow \frac{k}{m} = \omega^2 \Rightarrow k = m\omega^2.$$

Итак, уравнение Шредингера для координатной функции $\Psi(x)$ принимает вид:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right) \Psi = 0. \quad (17.6)$$

Введем новую безразмерную переменную, это позволит нам свести задачу к решению известного из математического анализа дифференциального уравнения:

$$c = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \cdot x. \quad (17.8)$$

Тогда уравнение (17.6) запишется так:

$$\Psi'' + (I - c^2)\Psi = 0, \quad (17.9)$$

где

$$I = \frac{2E}{\hbar\omega}. \quad (17.10)$$

Будем решать уравнение (17.9) методом нахождения асимптотических решений. Очевидно, что, когда $x \rightarrow \infty$, $c^2 \gg I$ и тогда в уравнении (17.9) можно пренебречь величиной I , и это уравнение принимает вид:

$$\Psi''_{ac} - c^2\Psi_{ac} \approx 0. \quad (17.11)$$

Легко убедиться прямой подстановкой, что решением этого уравнения будет функция $\Psi_{ac} \approx e^{\pm \frac{c^2}{2}}$.

Из двух решений (\pm) нужно оставить только решение со знаком (-), так как только оно удовлетворит конечности решения на бесконеч-

ности. Саму же функцию Ψ , удовлетворяющую поставленной задаче, будем искать в виде

$$\Psi = u \cdot \Psi_{ac} = u \cdot e^{-\frac{c^2}{2}}, \quad (17.12)$$

где функция u не должна расти быстрее второго множителя в (17.12), только в этом случае функция Ψ будет конечной на бесконечности.

Подставляя функцию (17.12) в уравнение (17.9), получаем для функции u следующее дифференциальное уравнение:

$$u'' - 2\chi \cdot u' + (\lambda - 1)u = 0. \quad (17.13)$$

Возьмем функцию u в виде ряда по степеням величины C :

$$u(x) = a_0 + a_1 C + a_2 C^2 + \dots + a_k C^k + \dots \quad (17.14)$$

После подстановки (17.14) в (17.13) и элементарных упрощений, получим для коэффициентов ряда (17.14) следующее равенство:

$$\sum_{k=2}^{\infty} k(k-1)a_k C^{k-2} - 2C \sum_{k=1}^{\infty} ka_k C^{k-1} + (I-1) \sum_{k=0}^{\infty} a_k C^k = 0. \quad (17.15)$$

Известно: сумма бесконечного степенного ряда тождественно равна нулю только в том случае, когда коэффициенты при всех степенях независимой переменной равны нулю. Приравнивая нулю сумму коэффициентов при одинаковых степенях, получаем следующие рекуррентные соотношения для определения коэффициентов a_k :

$$a_{k+2}(k+2)(k+1) - 2ka_k + (I-1)a_k = 0,$$

откуда

$$a_{k+2} = a_k \frac{2k - I + 1}{(k+2)(k+1)}. \quad (17.16)$$

И при

$$k \rightarrow \infty \text{ получаем: } \frac{a_{k+2}}{a_k} \approx \frac{2}{k}. \quad (17.17)$$

Покажем, что такое же соотношение имеется у коэффициентов ряда, которым можно представить функцию e^{c^2} :

$$\begin{aligned}
 e^{c^2} &= 1 + c^2 + \frac{c^4}{2!} + \frac{c^6}{3!} + \dots + \frac{c^k}{\left(\frac{k}{2}\right)!} + \frac{c^{k+2}}{\left(\frac{k}{2} + 1\right)!} + \dots = \\
 &= 1 + c^2 + \dots + b_k c^k + b_{k+2} c^{k+2} + \dots
 \end{aligned}$$

Составим отношение двух соседних коэффициентов этого бесконечного ряда:

$$\frac{b_{k+2}}{b_k} = \frac{\left(\frac{k}{2}\right)!}{\left(\frac{k}{2} + 1\right)!} \approx \left(\frac{k}{2}\right)^{-1} = \frac{2}{k}. \quad (17.18)$$

Но точно такое же соотношение мы получили для коэффициентов ряда (17.14). Сопоставляя ему функцию e^{c^2} , мы должны потребовать, чтобы этот ряд обрывался на каком-то члене (в противном случае функция (17.14) будет расходящейся). Будем считать, что последним членом в этом ряде будет член с номером n : $a_n \neq 0$, $a_{n+2} = 0$, тогда из (17.16) следует, что

$$I = I_n = 2n + 1. \quad (17.19).$$

Формула (17.10) при учете (17.19) дает для энергии квантового гармонического осциллятора чрезвычайно важную формулу:

$$E = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (17.20).$$

При составлении ряда (17.14) предполагалось, что индекс суммирования пробегает всевозможные значения от 0 до бесконечности. Обрывая ряд на члене с индексом n , мы по-прежнему можем считать, что этот индекс принимает все значения, начиная от нуля. Рассмотрим, что получится, если $n=0$. При этом, как следует из формулы (17.20), энергия осциллятора оказывается не равной нулю:

$$E = \frac{1}{2} \hbar\omega.$$

Эту энергию называют *нулевой энергией осциллятора*. Она имеет большое не только физическое, но и философское содержание. Обсудим этот момент.

По классическим представлениям при абсолютном нуле температуры система частиц обладает наименьшей энергией, равной нулю. Прекращается всякое механическое движение. И классический осциллятор должен прекратить всякое движение. Формула (17.20) утверждает, что квантовый осциллятор даже при абсолютном нуле температуры (гипотетически) не может находиться в покое, так как он будет обладать нулевой энергией

$$E = \frac{1}{2} \hbar \omega .$$

Следовательно, и все твердое тело, которое мы рассматриваем как совокупность осцилляторов, будет обладать отличной от нуля энергией. Из этого следует, что движение неуничтожимо. Полученный результат находится в соответствии с основными положениями квантовой механики, которые сформулированы сжато в соотношениях неопределенностей Гейзенберга. Опыт подтверждает данный вывод квантовой механики. При наблюдении рассеяния электромагнитных волн кристаллической решеткой при понижении температуры наблюдается понижение интенсивности рассеяния. Но при определенной температуре вблизи абсолютного нуля прекращается уменьшение рассеяния - это так называемое остаточное рассеяние, которое обусловлено нулевыми колебаниями структурных частиц твердого тела.

18. Туннельный эффект

В конце XIX века было открыто явление радиоактивного альфа-распада. Только почти через 30 лет в квантовой механике была объяснена физика этого явления. В основе альфа-распада лежит принципиально новое физическое явление, неизвестное и невозможное в классической физике, – туннельный эффект. На основе этого явления удалось понять физику и ряда известных и вновь открываемых явлений, как-то контактную разность потенциалов, холодную электронную эмиссию, эффект Джозефсона, принцип действия туннельного диода и ряд других явлений.

Выясним суть туннельного эффекта, рассмотрев следующую идеализированную задачу: на пути свободной частицы возникло препятствие - потенциальный барьер, высота которого в энергетических единицах больше энергии частицы. Ставится квантово-механический вопрос: способна ли частица преодолеть этот барьер и, если да, то какова вероятность этого процесса?

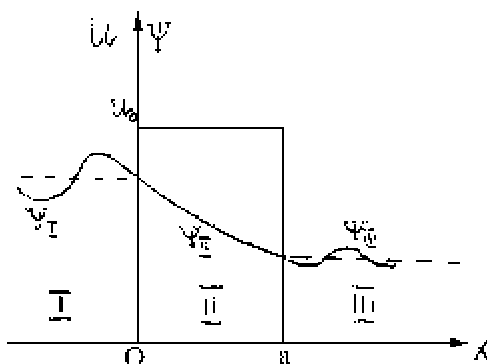


Рис. 4.

Для решения задачи выберем систему отсчета “Потенциальный барьер” и сделаем в ней чертеж (см. рис.4). Уточним содержание понятия “потенциальный барьер”. Под этим понятием мы будем понимать область действия некоторого поля сил. Выберем прямоугольную форму потенциального барьера, эта идеализация существенно упростит математическое рассмотрение зада-

чи. Как видно из рис.4 потенциальный барьер взят конечной высоты U_0 и конечной ширины a . Пусть частица движется слева направо из области, расположенной левее потенциального барьера (ПБ), и при этом обладает кинетической энергией (свободная частица!), меньшей высоты ПБ:

$E < U_0$. По классическим представлениям частица должна была бы отразиться от стенки ПБ и остаться слева от него. Квантово-механическое рассмотрение этой же задачи приводит к принципиально другому результату благодаря тому, что частица обладает корпускулярно-волновым дуализмом: частица имеет определенную вероятность не только отразиться от стенки ПБ, но и проникнуть внутрь его. А при определенной ширине ПБ имеется определенная вероятность оказаться частице и правее ПБ. Именно этот эффект и называется эффектом туннелирования.

Для рассмотрения данной задачи необходимо решить координатное уравнение Шредингера (временная зависимость волновой функции во всех задачах одинакова и была найдена ранее). Так как мы рассматриваем одномерную задачу, то уравнение Шредингера запишем в виде:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + U_0 \Psi = E \Psi,$$

или

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0) \Psi = 0. \quad (18.1)$$

В 1-ой и 3-ей областях частица движется свободно, поэтому для этих областей уравнение (18.1) запишется так:

$$\frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \Psi_1 = 0, \text{ или } \frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial x^2} + k_1^2 \Psi_1 = 0,$$

где

$$k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}. \quad (18.2)$$

Уравнение для 3-ей области будет отличаться только индексом:

$$\frac{\partial^2 \Psi_3}{\partial x^2} + k_3^2 \Psi_3 = 0, \text{ где } k_3^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}. \quad (18.3)$$

Обратим внимание на то, что и в 1-ой и в 3-ей областях энергия частицы одна и та же, так как процесс туннелирования не связан с совершением работы, а обусловлен корпускулярно-волновыми свойствами туннелирующей частицы, для описания движения которой мы и используем уравнение Шредингера.

Так как в 1-ой и 3-ей областях частица движется свободно, то мы можем тотчас же написать решения уравнений (18.2) и (18.3):

$$\Psi_1 = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x} \quad (18.4)$$

и

$$\Psi_3 = A_3 e^{ik_3(x-a)} + B_3 e^{-ik_3(x-a)}. \quad (18.5)$$

Первые слагаемые в решениях (18.4) и (18.5) определяют плоские волны, которые движутся в положительном направлении на оси Ox . Вторые - определяют плоские волны, движущиеся в обратном направлении. И если в 1-ой области волна, дойдя до барьера, может отразиться, то в 3-ей области правее барьера больше препятствия нет, поэтому в 3-ей области не будет волны, идущей в отрицательном направлении оси Ox . Это дает нам право приравнять коэффициент $B_3 = 0$. И тогда решением в 3-ей области будет функция:

$$\Psi_3 = A_3 e^{ik_3(x-a)}. \quad (18.6)$$

Движение частицы во 2-ой области описывается решением уравнения (18.1). Введем обозначение:

$$k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0) \quad (18.7)$$

Так как $E < U_0$, то $k_2^2 < 0$. Поэтому для дальнейшего целесообразно ввести дополнительное волновое число k' следующим образом:

$$k_2 = ik', \text{ где } k' = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(U_o - E)}.$$

Уравнение (18.1) для 2-ой области запишется так:

$$\frac{\partial^2 \Psi_2}{\partial x^2} + k_2^2 \Psi_2 = 0. \quad (18.8)$$

И уравнение для волновой функции и в области 2 приняло тот же вид, что и для областей 1-ой и 3-ей, с тем, однако, принципиальным отличием, что волновое число k_2 является мнимым числом. Запишем решение уравнения (18.8) в той же форме как для свободной частицы:

$$\Psi_2 = A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{(-ik_2 x)},$$

или, переходя к волновому числу k' , имеем:

$$\Psi_2 = A_2 e^{(iik'x)} + B_2 e^{(-iik'x)} = A_2 e^{(-k'x)} + B_2 e^{(k'x)}. \quad (18.9)$$

Введем новые величины: коэффициент отражения R и коэффициент туннелирования D . Определим их следующим образом:

$$R = \frac{|j_{omp}|}{|j_{nao}|} \quad \text{и} \quad D = \frac{|j_{npou}|}{|j_{nao}|}, \quad (18.10)$$

где плотности потоков определяются по формуле, которая для одномерного случая принимает вид:

$$j = \frac{\hbar}{2m} \left(\Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} - \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right)$$

Используя полученные выше выражения для волновых функций Ψ_1 , Ψ_2 и Ψ_3 , (18.4), (18.6), (18.9), получим для коэффициентов (18.10) следующие значения:

$$R = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2} \quad \text{и} \quad D = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2}. \quad (18.11)$$

Определим коэффициенты A_1 , A_3 , B_1 , используя непрерывность самих волновых функций при переходе из одной области в другую, а также непрерывность их первых производных:

$$\begin{aligned} A_1 + B_1 &= A_2 + B_2, \\ A_2 e^{(-k_2'a)} + B_2 e^{(k_2'a)} &= A_3, \end{aligned} \quad (18.12)$$

$$ik_1(A_1 - B_1) = k_2'(B_2 - A_2),$$

$$k_2'(B_2 e^{k_2'a} - A_2 e^{-k_2'a}) = ik_3 A_3,$$

причем, что было отмечено выше, коэффициенты $k_1 = k_3$ (см. их определения).

Из этой системы равенств можно получить соотношения для всех пяти коэффициентов A_1, A_2, B_1, B_2, A_3 .

Так как число равенств, связывающих пять коэффициентов, на одно меньше, то имеется возможность одной из переменных задать произвольное значение, не противоречащее условию задачи. Мы воспользуемся этим ниже.

Составим плотности потоков $j_{над}$, $j_{отр}$, $j_{прои}$, используя исходную формулу для плотности потока:

$$j = \frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} - \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right).$$

Покажем расчет этих величин на примере одной из них.

$$j_{над} = \frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi_{над} \frac{\partial \Psi_{над}^*}{\partial x} - \Psi_{над}^* \frac{\partial \Psi_{над}}{\partial x} \right) =$$

$$= \frac{i\hbar}{2m} \{ A_1 e^{(ik_1x)} \cdot (-ik_1) A_1^* e^{(-ik_1x)} - A_1^* e^{(-ik_1x)} A_1 e^{(ik_1x)} \cdot (ik_1) \} =$$

$$= \frac{i\hbar}{2m} |A_1|^2 (-ik_1 - ik_1) = \frac{\hbar k_1}{m} |A_1|^2. \quad (18.13)$$

Аналогично можно рассчитать и плотности потоков $j_{отр}$ и $j_{прои}$:

$$j_{отр} = -\frac{\hbar k_1}{m} |B_1|^2 \quad \text{и} \quad j_{прои} = \frac{\hbar k_3}{m} |A_3|^2, \quad (18.14)$$

причем $k_1 = k_3$.

Решая систему равенств (18.12), получим значения коэффициентов

$$A_1, A_2, B_1 \text{ и } B_2: A_2 = \frac{1-in}{2} A_3 e^{(k_2'a)} \text{ и } B_2 = \frac{1+in}{2} A_3 e^{(-k_2'a)},$$

где $n = \frac{k_3}{k_2} = \sqrt{\frac{E}{U_0 - E}}$.

Так как $|1 - in| = |1 + in|$, то можно пренебречь коэффициентом B_2 , так как $|A_2| \gg |B_2|$.
 А зная эти коэффициенты, из первого равенства (18.12) найдем коэффициенты A_1 и B_1 :

$$A_1 = \frac{1 - in}{2} \cdot \frac{i + n}{2n} A_3 e^{(k'_2 a)}, \quad \text{и} \quad B_1 = \frac{1 - in}{2} \cdot \frac{n - i}{2n} A_3 e^{(k'_2 a)}.$$

Отсюда для коэффициента туннелирования получаем:

$$D = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} = \frac{16n^2}{(1 + n^2)^2} e^{(-2k'_2 a)} = \frac{16n^2}{(1 + n^2)^2} e^{\left(-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)a^2}\right)}. \quad (18.15)$$

Коэффициент $R = 1 - D$, что следует из неуничтожимости частиц и достоверности, равной единице, что частица находится либо перед, либо после барьера. Полученный результат есть проявление корпускулярно-волнового дуализма элементарных частиц, эффект туннелирования невозможен в классической физике. Как видно из (18.15) коэффициент туннелирования отличен от нуля как при $E > U_0$, так и при $E < U_0$. Интересно, что при $E > U_0$ частица может не только туннелировать, но и испытать отражение от барьера ($R \neq 0$). Полученные результаты с классической точки зрения парадоксальны, однако они подтверждаются экспериментально, например в радиоактивном альфа-распаде, или в холодной электронной эмиссии, или в работе туннельного диода и т.д.

Из формулы (18.15) следует, что процесс туннелирования тем вероятнее, чем меньше разность $U_0 - E$ и чем уже ширина потенциального барьера a . Коэффициент прозрачности существенно зависит от массы частицы. В качестве иллюстрации высказанных утверждений приведем количественный пример: каков коэффициент прозрачности D барьера прямоугольной формы при $U_0 = 20$ эВ, $a = 10^{-10}$ м для электрона и протона с энергиями 10 эВ. Расчет по формуле (18.15) дает следующие результаты: для

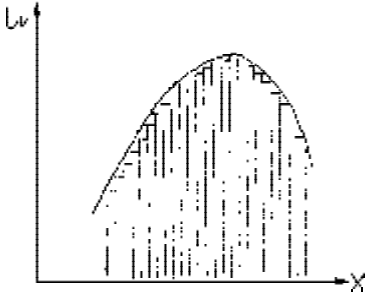


Рис. 5

электрона $D_{эл} = 0,157$; для протона (масса которого почти в 2000 раз больше массы электрона) $D_{пр} \approx 10^{-60}$.

Реальные потенциальные барьеры имеют сложную конфигурацию. На рис. 5 представлен потенциальный барьер, который приближенно можно представить в виде последовательности потенциальных барьеров прямоугольной формы. Для каждого последующего прямоугольного потенциального барьера начальным числом частиц будет то их число, которое прошло через предыдущий прямоугольный барьер. Поэтому результирующий коэффициент прохождения через барьер произвольной формы приближенно будет равен произведению коэффициентов прозрачности через отдельные прямоугольные потенциальные барьеры. Таким образом, в случае потенциального барьера произвольной формы $U(x)$ коэффициент прозрачности D можно представить следующим образом:

$$D = D_0 e^{\left\{ \frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m[U(x)-E]} dx \right\}}. \quad (18.16)$$