

Атомная физика

Лекция 16

М.Ю. Рябикин

канд. физ.-мат. наук, в.н.с. ИПФ РАН

ННГУ им. Н.И. Лобачевского, ВШОПФ

2025

Потенциальные ямы и барьеры (часть 2)

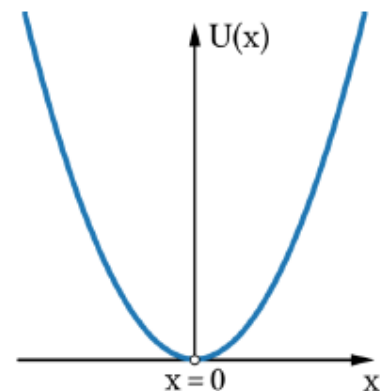
Гармонический осциллятор

Рассмотрим теперь задачу об определении стационарных состояний одномерного гармонического осциллятора.

Гармонический осциллятор – это система, потенциальная энергия которой в 1D случае записывается как

$$V(x) = m\omega^2 x^2 / 2, \quad (16.1)$$

где ω – частота колебаний.



Задача о гармоническом осцилляторе является одной из важнейших в квантовой теории. Приближение гармонического осциллятора часто используется в физике молекул при рассмотрении колебательного движения молекул, в теории атомного ядра при изучении низколежащих ядерных состояний, в различных задачах физики твердого тела и т.д. Важно отметить, что ЭМ поле может быть рассмотрено как совокупность полевых мод, каждая из которых также является гармоническим осциллятором.

Гамильтониан 1D гармонического осциллятора имеет вид

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}. \quad (16.2)$$

Для определения собственных функций и собственных значений оператора \hat{H} необходимо решить уравнение

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \psi = E \psi. \quad (16.3)$$

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} - \frac{m^2 \omega^2 x^2}{\hbar^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \right) \psi(x) = 0. \quad (16.3a)$$

Потенциал (16.1) при $|x| \rightarrow \infty$ стремится к бесконечности, поэтому в этом пределе ВФ должна стремиться к нулю.

Уравнение (16.3a) удобно обезразмерить. Вводя новые безразмерные координату $\xi = x/a$ и энергию $\varepsilon = E/E_0$ ($a = \sqrt{\hbar/m\omega}$, $E_0 = \hbar\omega/2$), перепишем (16.3a) в виде

$$\left(\frac{d^2}{d\xi^2} - \xi^2 + \varepsilon \right) \psi(\xi) = 0. \quad (16.4)$$

Начнем решение задачи с анализа асимптотического поведения ВФ при $\xi \rightarrow \pm\infty$. При больших значениях ξ последним слагаемым в (16.4) можно пренебречь, т.е.

$$\frac{d^2 \psi}{d\xi^2} - \xi^2 \psi \approx 0. \quad (16.4a)$$

Решение этого уравнения имеет асимптотику $\psi \sim \exp(-\xi^2/2)$. Действительно, для такой функции $\psi'' = (\xi^2 - 1) \exp(-\xi^2/2)$, т.е. при $|\xi| \gg 1$ главные вклады, пропорциональные ξ^2 , сокращаются, и уравнение (16.4a) оказывается выполненным.

Будем искать решение уравнения (16.4) в виде

$$\psi(\xi) = v(\xi) \exp(-\xi^2/2), \quad (16.5)$$

где $v(\xi)$ – некоторая новая неизвестная функция, не меняющая асимптотику функции $\psi(\xi)$ на бесконечности. Получим выражения для производных:

$$\frac{d\psi}{d\xi} = (v' - \xi v) \exp(-\xi^2/2);$$

$$\begin{aligned} \frac{d^2\psi}{d\xi^2} &= \frac{d}{d\xi} \left((v' - \xi v) \exp(-\xi^2/2) \right) = [v'' - v - \xi v' - (v' - \xi v)\xi] \exp(-\xi^2/2) = \\ &= (v'' - v - 2\xi v' + \xi^2 v) \exp(-\xi^2/2). \end{aligned}$$

Подставим представление (16.5) и найденное выражение для $\frac{d^2\psi}{d\xi^2}$ в уравнение (16.4).

В результате для функции $v(\xi)$ получим новое уравнение:

$$v'' - 2\xi v' + (\varepsilon - 1)v = 0. \quad (16.6)$$

Будем искать решение уравнения (16.6) в виде полинома конечной степени по ξ , т.е.

$$v(\xi) = \sum_{k=0}^n a_k \xi^k. \quad (16.7)$$

Позже мы увидим, что решение (16.6) именно в виде полинома, а не бесконечного ряда, позволяет сохранить правильное асимптотическое поведение ВФ на бесконечности. Подставляя разложение (16.7) в уравнение (16.6) и собирая слагаемые при одинаковых степенях ξ , получим

$$\sum_{k=0}^n [(k+2)(k+1)a_{k+2} + (\varepsilon - 1 - 2k)a_k] \xi^k = 0.$$

Поскольку это равенство должно удовлетворяться при любом значении ξ , получаем следующее рекуррентное соотношение между коэффициентами полинома:

$$a_{k+2} = \frac{2k - (\varepsilon - 1)}{(k+2)(k+1)} a_k. \quad (16.8)$$

Если известны коэффициенты a_0 и a_1 , то остальные можно найти с помощью (16.8). Ряд будет конечным, если на некотором слагаемом с номером $k > n$ коэффициент a_k обратится в ноль. Из (16.8) имеем, что это возможно если

$$\varepsilon = 2n + 1,$$

или, переходя к размерным единицам,

$$E_n = \hbar\omega(n + 1/2), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (16.9)$$

Условие обрыва ряда не может быть выполнено одновременно и для четных и для нечетных членов разложения. Поэтому полином (16.7) должен содержать только четные, или только нечетные степени ξ . Это соответствует уже известному нам общему свойству ВФ для 1D движения: если $U(x)$ – чётная функция, то ВФ имеет определённую чётность, т.е. может быть или чётной, или нечётной. Для чётной функции, стартуя с коэффициента a_0 , получим с помощью рекуррентного соотношения (16.8) все остальные чётные коэффициенты по цепочке

$$a_0 \rightarrow a_2 \rightarrow a_4 \rightarrow \dots,$$

а для всех нечётных коэффициентов будем иметь

$$a_1 = a_3 = \dots = 0.$$

Аналогично, для нечётной функции, стартуя с коэффициента a_1 , получим все остальные нечётные коэффициенты по цепочке

$$a_1 \rightarrow a_3 \rightarrow a_5 \rightarrow \dots,$$

а для всех чётных коэффициентов будем иметь

$$a_0 = a_2 = \dots = 0.$$

Таким образом, задача решена. Выражение (16.9) определяет энергетический спектр гармонического осциллятора, а ВФ-и представимы в виде (16.5), где функции $v(\xi)$ есть полиномы, которые легко построить с помощью рекуррентного соотношения (16.8).

Если бы мы искали решение уравнения (16.6) в виде бесконечного ряда, то для больших значений k мы бы получили связь между коэффициентами [см. (16.8)]:

$$a_{k+2} \approx \frac{2}{k} a_k, \quad k \rightarrow \infty.$$

Именно такая связь между коэффициентами возникает при тейлоровском разложении функции

$$\exp(\xi^2) = \sum_{k=0,2,4,\dots}^{\infty} \frac{\xi^k}{(k/2)!}.$$

Подставляя эту функцию в качестве первого множителя в искомую ВФ (16.5), получаем, что результирующая волновая функция на бесконечности неограниченно возрастает.

Полиномы, коэффициенты которых удовлетворяют рекуррентному соотношению (16.8), хорошо известны в математике и называются полиномами Эрмита. Явные выражения для первых нескольких полиномов:

$$H_0(\xi) = 1, \quad H_1(\xi) = 2\xi, \quad H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2, \quad H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi, \dots \quad (16.10)$$

Все полиномы Эрмита являются либо четными, либо нечетными функциями ξ .

→ В рассматриваемой задаче стационарные состояния опять характеризуются определенной четностью. Это естественно, т.к. гамильтониан (16.2) инвариантен относительно преобразования инверсии.

Некоторые известные формулы для полиномов Эрмита.

Часто используют следующий вид записи полиномов Эрмита:

$$H_n(\xi) = (-1)^n \exp(\xi^2) \frac{d^n}{d\xi^n} \exp(-\xi^2). \quad (16.11)$$

Они также могут быть определены как коэффициенты разложения в ряд Тейлора функции $\Psi(\xi, t) = \exp(2t\xi - t^2)$:

$$\Psi(\xi, t) = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(\xi) \frac{t^n}{n!}. \quad (16.12)$$

Функция $\Psi(\xi, t)$ называется *производящей функцией* полиномов Эрмита.

Полиномы Эрмита удовлетворяют следующим рекуррентным соотношениям:

$$\xi H_n(\xi) = n H_{n-1}(\xi) + \frac{1}{2} H_{n+1}(\xi), \quad (16.13)$$

$$H'_n(\xi) = 2n H_{n-1}(\xi). \quad (16.14)$$

Выпишем также условие ортонормированности полиномов Эрмита:

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_m(\xi) H_n(\xi) \exp(-\xi^2) d\xi = 2^n n! \sqrt{\pi} \delta_{mn}. \quad (16.15)$$

Условие (16.15) позволяет записать удовлетворяющие условию нормировки ВФ-и стационарных состояний гармонического осциллятора:

$$\psi_n(x) = N_n H_n(x/a) \exp(-x^2/2a^2), \quad (16.16)$$

где нормировочный множитель N_n определяется как

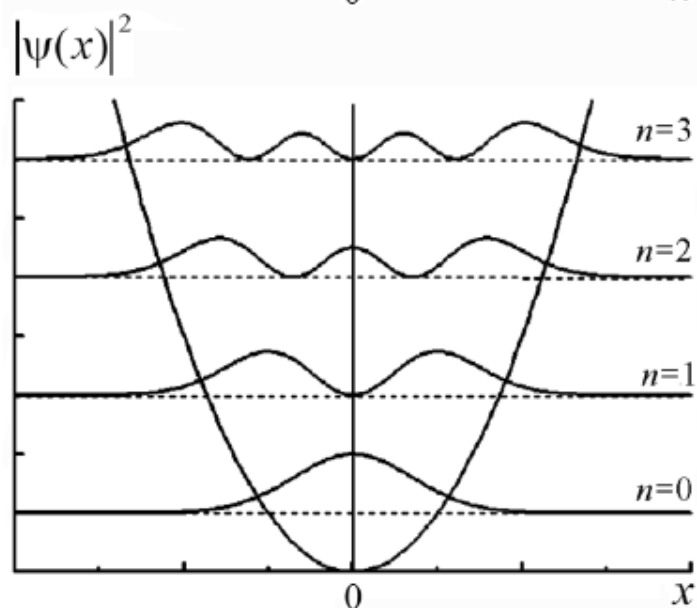
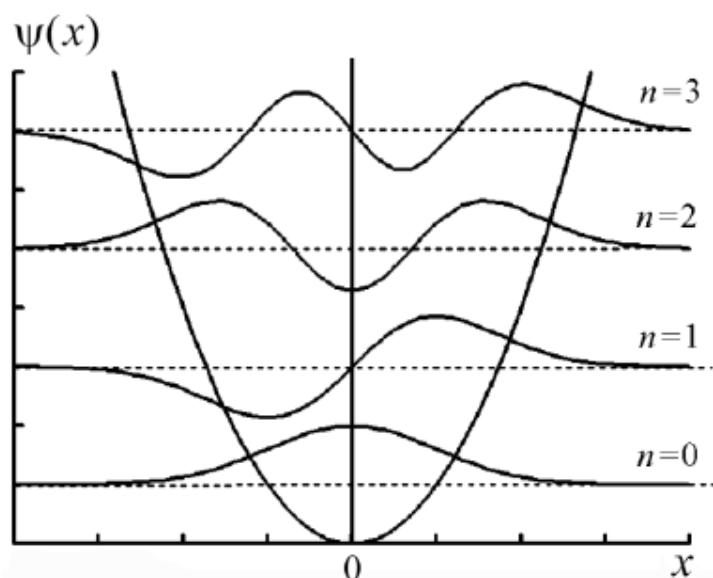
$$N_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n! a \sqrt{\pi}}}. \quad (16.17)$$

Обсудим свойства полученного решения.

Прежде всего отметим, что энергетический спектр осциллятора строго дискретный, как и у всякой системы, совершающей финитное движение. Энергия основного состояния (которое часто называют *вакуумным состоянием* осциллятора) отлична от нуля: существуют так называемые *нулевые колебания*; их энергия оказывается равна

$$E_0 = \hbar\omega/2, \quad (16.18)$$

и это минимально возможное значение энергии осциллятора.



На верхнем рисунке приведено положение нескольких нижних энергетических уровней осциллятора. Для этих же состояний на нижнем рисунке представлены распределения плотности вероятности $|\psi(x)|^2$. Важной особенностью энергетического спектра гармонического осциллятора является его *эквидистантность*, т.е. энергетическое расстояние между любой парой уровней одинаково:

$$E_n - E_{n-1} = \hbar\omega. \quad (16.19)$$

Как и в ранее рассмотренных задачах, существует ненулевая вероятность обнаружить частицу в области классически запрещенного движения.

Средние значения кинетической и потенциальной энергии отличны от нуля и равны между собой:

$$\langle T \rangle_n = \langle V \rangle_n = E_n/2. \quad (16.20)$$

$$\begin{aligned}\langle T \rangle_n &= \left\langle p^2 / 2m \right\rangle_n = \frac{1}{2m} \int \psi_n^* \hat{p}^2 \psi_n dx = \frac{\hbar \omega}{2} (n + 1/2), \\ \langle V \rangle_n &= \left\langle m \omega^2 x^2 / 2 \right\rangle_n = \frac{m \omega^2}{2} \int \psi_n^* x^2 \psi_n dx = \frac{\hbar \omega}{2} (n + 1/2).\end{aligned}\quad (16.21)$$

Связь с классическим движением.

Распределения плотности вероятности в стационарных состояниях не зависят от времени. Как «увидеть» колебания частицы, аналогичные классическим колебаниям?

Рассмотрим простейший случай суперпозиционного состояния осциллятора. Пусть в начальный момент времени состояние частицы описывается ВФ-ей, которая является суперпозицией двух нижних стационарных состояний осциллятора:

$$\psi(x, t = 0) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_0(x) + \psi_1(x)). \quad (16.22)$$

Решая нестационарное уравнение Шредингера, найдём, что ВФ-я системы, описывающая эволюцию её состояния во времени, запишется в виде

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_0(x) \exp\left(-i \frac{\omega t}{2}\right) + \psi_1(x) \exp\left(-i \frac{3\omega t}{2}\right) \right). \quad (16.23)$$

Для плотности вероятности получаем

$$\rho(x, t) = |\psi(x, t)|^2 = \frac{1}{2} |\psi_0(x)|^2 + \frac{1}{2} |\psi_1(x)|^2 + \psi_0(x) \psi_1(x) \cos \omega t. \quad (16.24)$$

Первые два слагаемых в (16.24) не зависят от времени и дают некоторое статическое распределение плотности вероятности, однако третье слагаемое показывает, что плотность вероятности перетекает из одной пространственной области в другую с частотой колебаний классической частицы. Действительно, положим $\cos \omega t = 1 \rightarrow$

$\rho(x, t) = \frac{1}{2} |\psi_0 + \psi_1|^2 \rightarrow$ Частица локализована у правой стенки. Через полпериода:

$\cos \omega t = -1 \rightarrow \rho(x, t) = \frac{1}{2} |\psi_0 - \psi_1|^2 \rightarrow$ Частица локализована у левой стенки.

Установить ещё более явную аналогию с классикой можно, если найти среднее значение координаты частицы:

$$\langle x(t) \rangle = \int x \rho(x, t) dx = \int x \left(\frac{1}{2} |\psi_0(x)|^2 + \frac{1}{2} |\psi_1(x)|^2 + \psi_0(x) \psi_1(x) \cos \omega t \right) dx = x_{01} \cos \omega t, \quad (16.25)$$

где

$$x_{01} = \int x \psi_0(x) \psi_1(x) dx = a / \sqrt{2} = \sqrt{\hbar / 2m\omega}. \quad (16.26)$$

Для вычисления приведенных выше интегралов удобно использовать выписанные ранее рекуррентные соотношения для полиномов Эрмита.

Согласно (16.25), (16.26) частица совершает колебательное движение с частотой классических колебаний и амплитудой $x_{01} = \sqrt{\hbar / 2m\omega}$.

Таким образом, мы видим, что движение волнового пакета, подобное движению классической частицы в потенциале (16.1), возникает только в нестационарном состоянии. В этом смысле стационарные состояния являются чисто квантовыми и не имеют аналога в классической механике.

Можно, однако, как мы уже делали для прямоугольной ямы, сопоставить квантово-механические плотности вероятности, соответствующие стационарным состояниям, и распределение вероятности обнаружить классический осциллятор в некотором определенном положении в случайный момент времени.

Пусть классическая частица совершает колебательное движение по закону

$$x = x_0 \cos \omega t. \quad (16.27)$$

Тогда в интервале координат $(x, x + dx)$ частица находится в течение времени dt :

$$dt = \frac{dx}{|\dot{x}|} = \frac{dx}{x_0 \omega \sqrt{1 - (x/x_0)^2}}.$$

$$[|\dot{x}| = x_0 \omega \sin \omega t; \sin \omega t = \sqrt{1 - \cos^2 \omega t} = \sqrt{1 - (x/x_0)^2}].$$

В отличие от случая прямоугольной ямы, скорость движения классической частицы в потенциале (16.1) не одинакова в любой точке, а является максимальной в центре ямы и обращается в ноль в точках поворота $x = \pm x_0$.

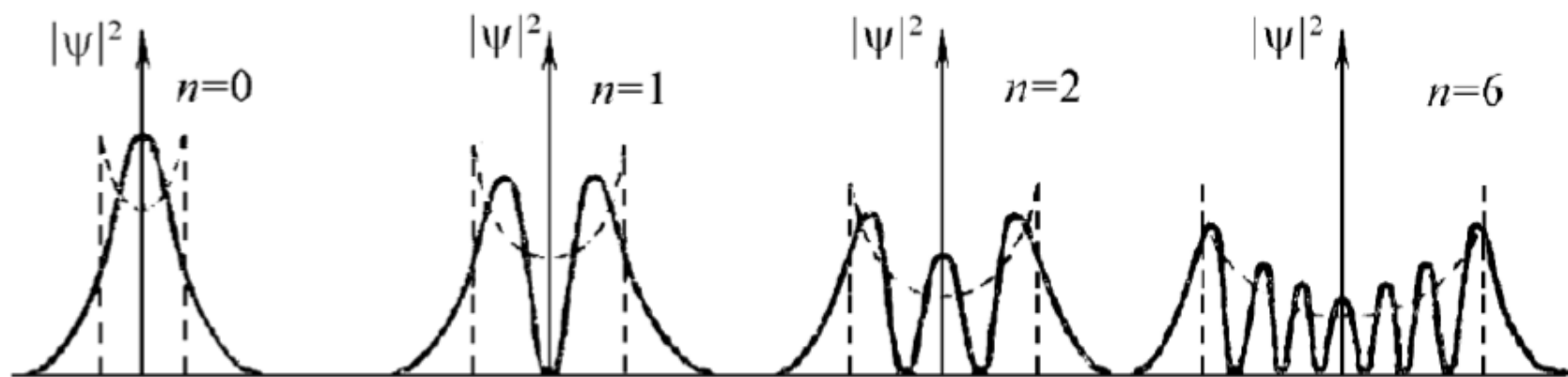
Поскольку частица проходит все возможные значения своего положения за половину периода, то вероятность обнаружить ее в интервале $(x, x + dx)$ есть

$$dW = \frac{2dt}{T} = \frac{dx}{\pi x_0 \sqrt{1 - (x/x_0)^2}}. \quad (16.28)$$

Как видно, максимальная вероятность для классического осциллятора достигается вблизи точек поворота. Это понятно: вблизи точки поворота скорость частицы мала, и поэтому она там долго находится. Сопоставим полученную нами классическую плотность вероятности

$$\rho_d(x) = \frac{1}{\pi x_0 \sqrt{1 - (x/x_0)^2}} \quad (16.29)$$

с квантовомеханической величиной $|\psi(x)|^2$. Зависимости $\rho_d(x)$ и $|\psi(x)|^2$ для различных состояний с определенными значениями энергии представлены на рисунке.



Как видно, для малых квантовых чисел поведение кривых существенно различно. Однако для больших n (для сильно возбужденных состояний) усредненная кривая для распределения плотности вероятности квантовомеханического осциллятора хорошо согласуется с кривой для классического осциллятора.

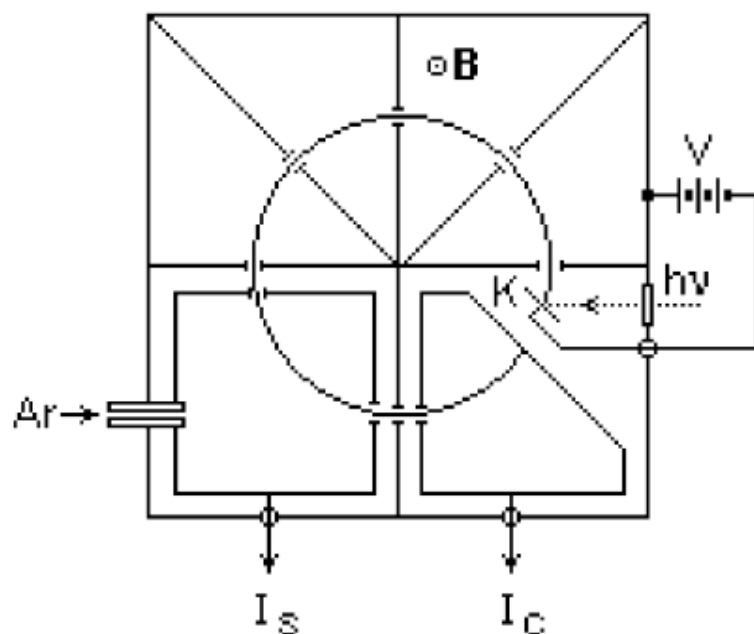
Рассеяние частицы на потенциальной яме

Рассеяние частиц на потенциальных ямах является одним из важных классов задач квантовой механики. В атомной физике, в частности, квантовомеханическое рассмотрение задачи такого типа позволяет объяснить явление, известное как *эффект Рамзауэра* (или Рамзауэра-Таунсенда).

Эффект Рамзауэра

Карл Рамзауэр (немецкий физик, 1921):
Эксперименты по упругому рассеянию электронов на атомах газа → Обнаружение особенностей рассеяния, не укладывающихся в рамки классической физики.

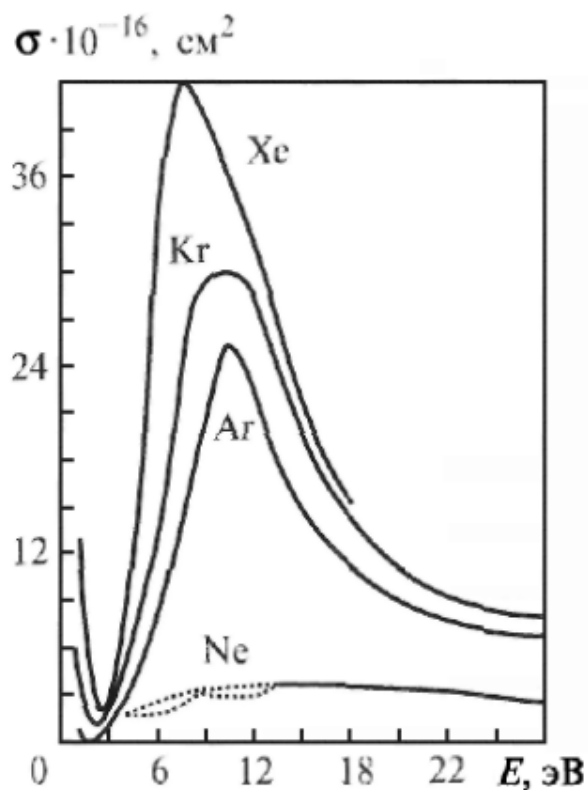
Схема экспериментальной установки Рамзауэра изображена на рисунке слева. Источником электронов является фотокатод К, освещаемый извне. Подбирая длину световой волны, можно варьировать энергию электронов, уменьшая её до очень малых значений. Электроны ускоряются разностью потенциалов между фотокатодом и первой щелью.



Для более точного задания энергии электронов можно использовать магнитное поле. Аппарат помещался в однородное магнитное поле, перпендикулярное плоскости рисунка. Электрон со скоростью v в однородном магнитном поле B движется по окружности, радиус которой определяется из соотношения $m \frac{v^2}{R} = evB$ и, соответственно, при заданных R и B скорость равна $v = \frac{e}{m} BR$.

Близкий к моноэнергетическому поток электронов попадает в камеру рассеяния. Электроны, рассеянные на длине примерно в четверть окружности, собираются на ее стенках. Их ток I_s измеряется гальванометром. Нерассеянные электроны попадают в камеру - коллектор, их ток I_c также измеряется. Сумма токов есть ток первичного пучка. Коэффициент ослабления $\mu = (1/L) \ln [(I_s + I_c)/I_c]$, где L – длина дуги четверти окружности. Тогда длина свободного пробега электрона равна $1/\mu$. Зная плотность газа, можно определить полное сечение рассеяния $\sigma = N/nv$ (N – число актов упругого рассеяния электронов на атомах в единицу времени, n – плотность электронов в пучке).

Сечение упругого рассеяния зависит от энергии электронов, причём, согласно классическим представлениям, при уменьшении энергии (т.е. скорости) электронов это сечение должно увеличиваться. Однако Рамзауэр в своих экспериментах получил результаты, противоречащие этим ожиданиям.

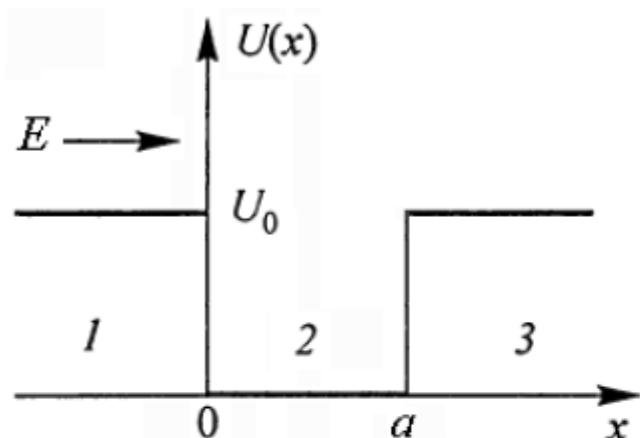


Исследуя прохождение потока очень медленных (с энергией от 0,75 эВ) электронов в аргоне, Рамзауэр обнаружил, что при уменьшении энергии электронов упругое рассеяние уменьшается, в результате чего электроны проходят через газ практически беспрепятственно. С увеличением энергии электронов сечение росло в аргоне до максимального значения при энергиях около 12 эВ, далее медленно убывало по мере роста энергии. Подобные результаты получались и для других инертных газов.

Обращение σ в ноль означает, что атомы становятся как бы прозрачными для электронов, т.е. электрон проходит через атом, не рассеиваясь на нём (хотя энергия электрона очень мала!) Этот экспериментальный результат может быть объяснен только при учёте волновой природы электрона.

Взаимодействие электронов с атомами инертных газов, имеющими замкнутые сферически симметричные электронные оболочки и компактную структуру с масштабами порядка боровского радиуса, можно упрощенно описать с помощью модели прямоугольной потенциальной ямы.

Рассеяние частицы на прямоугольной яме конечной глубины



Пусть частица с энергией $E > U_0$ налетает на прямоугольную потенциальную яму конечной глубины, двигаясь слева направо. Уравнение Шредингера в областях 1, 2 и 3 имеет следующие решения:

$$\begin{aligned}\psi_1(x) &= A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}, & x < 0 \\ \psi_2(x) &= A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x}, & 0 < x < a \\ \psi_3(x) &= A_3 e^{ik_1 x} + B_3 e^{-ik_1 x}, & x > a\end{aligned}\quad (16.30)$$

Здесь

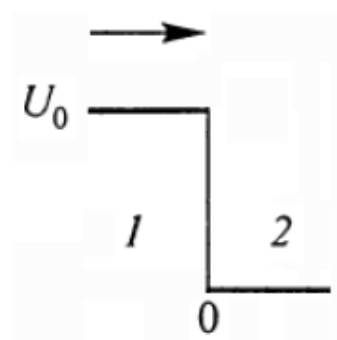
$$k_1 = \frac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar}, \quad k_2 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}. \quad (16.31)$$

Согласно (16.30), в каждой области ВФ есть сумма двух волн де Бройля: волны, идущей в положительном направлении оси x , и волны, идущей в обратном направлении.

Частица движется слева направо \rightarrow второе слагаемое в выражении для ψ_3 должно отсутствовать (нет потока к яме из $+\infty$) $\rightarrow B_3 = 0$.

В оптике при отражении и преломлении световой волны на границе раздела двух сред фаза волны изменяется, и характер этого изменения определяется различием в показателях преломления двух сред. Исходя из оптико-механической аналогии, этого же следует ожидать и в отношении отражённой и преломленной волн де Бройля. Роль, аналогичную роли показателя преломления в оптике, в КМ случае играет потенциал U . Резкой границе раздела двух сред соответствует скачок потенциала.

Рассмотрим по отдельности рассеяние волн де Бройля на левом и правом скачках потенциала.



Рассмотрим левую границу ямы, где происходит первый скачок потенциала. Исходя из требований непрерывности ВФ и её производной, для амплитуд волн де Бройля слева и справа от скачка потенциала получим соотношения

$$A_1 + B_1 = A_2, \quad (16.32a)$$

$$ik_1 A_1 - ik_1 B_1 = ik_2 A_2. \quad (16.32б)$$

Разделим (16.32a) и (16.32б), соответственно, на A_1 и $iA_1 \rightarrow$

$$1 + \frac{B_1}{A_1} = \frac{A_2}{A_1}, \quad (16.33a)$$

$$k_1 - k_1 \frac{B_1}{A_1} = k_2 \frac{A_2}{A_1}. \quad (16.33б)$$

Подставим $\frac{A_2}{A_1}$ из (16.33а) \rightarrow

$$k_1 - k_1 \frac{B_1}{A_1} = k_2 \left(1 + \frac{B_1}{A_1} \right).$$

$$\frac{B_1}{A_1} (k_1 + k_2) = k_1 - k_2 \rightarrow$$

$$\frac{B_1}{A_1} = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}. \quad (16.34а)$$

При $k_2 > k_1$ (т.е. для скачка вниз) B_1 и A_1 имеют противоположные знаки.

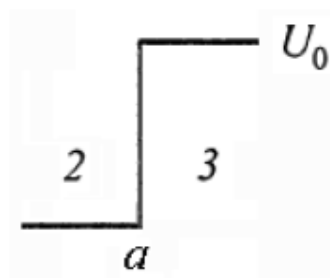
Из (16.33а) и (16.34а) \rightarrow

$$\frac{A_2}{A_1} = 1 + \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}. \quad (16.34б)$$

Амплитуда прошедшей волны не меняет знак.

Теперь рассмотрим рассеяние волны, прошедшей через первый скачок потенциала, на правой границе ямы, где происходит второй скачок потенциала.

Проводя рассмотрение так же, как для левой границы, получаем



$$\frac{B_2}{A_2} = \frac{k_2 - k_3}{k_2 + k_3} = \frac{k_2 - k_1}{k_1 + k_2}. \quad (16.35a)$$

При $k_2 > k_3$ (т.е. для скачка вверх) B_2 и A_2 имеют одинаковые знаки.

$$\frac{A_3}{A_2} = \frac{2k_2}{k_2 + k_3} = \frac{2k_2}{k_1 + k_2}. \quad (16.35b)$$

(16.34a), (16.35a) \rightarrow амплитуды волн, отражённых от левой и правой границ, имеют противоположные знаки: $B_1 = -A_1 \frac{k_2 - k_1}{k_1 + k_2}$, $B_2 = A_2 \frac{k_2 - k_1}{k_1 + k_2} \rightarrow$

$$\frac{B_2}{B_1} = -\frac{A_2}{A_1} = -\frac{2k_1}{k_1 + k_2}. \quad (16.36)$$

B_1 и B_2 сравнимы по величине и противоположны по знаку \rightarrow волна, отражённая от правой границы, пройдя без изменения знака (аналогично (16.35b)) через левую границу, будет в области 1 деструктивно интерферировать с волной, отражённой от левой границы. Эта интерференция будет максимальной, если разность хода ($2a$) равна целому числу длин волн де Бройля внутри ямы:

$$2a = \lambda_2 n. \quad (16.37)$$

Для нахождения коэффициентов прохождения и отражения как функций от энергии частицы необходимо решить полную систему уравнений на коэффициенты в волновой функции (16.30). Эти уравнения получаются из условий непрерывности ВФ и её производной в точках $x=0$ и $x=a$. Поскольку интересующие нас коэффициенты определяются отношением проходящего и отражённого потоков частиц к падающему, можем в дальнейшем положить амплитуду падающей волны равной единице: $A_1=1$. Получаем следующую систему уравнений:

$$1 + B_1 = A_2 + B_2,$$

$$ik_1 - ik_1 B_1 = ik_2 A_2 - ik_2 B_2,$$

$$A_2 e^{ik_2 a} + B_2 e^{-ik_2 a} = A_3 e^{ik_1 a},$$

$$ik_2 A_2 e^{ik_2 a} - ik_2 B_2 e^{-ik_2 a} = ik_1 A_3 e^{ik_1 a}. \quad (16.38)$$

Данная система уравнений имеет решение при любых значениях k_1 и k_2 , т.е. при любых значениях энергии частицы E . → При $E > U_0$ частица обладает непрерывным спектром энергий. Решая систему (16.38), для амплитуды прошедшей волны получаем

$$A_3 = \frac{4k_1 k_2 e^{-ik_1 a}}{(k_1 + k_2)^2 e^{ik_2 a} - (k_1 - k_2)^2 e^{-ik_2 a}}. \quad (16.39)$$

На практике исследуется не динамика каждой отдельной частицы, а относительная доля частиц, прошедших через потенциальный барьер или яму. Эта характеристика – коэффициент прохождения D – есть отношение модуля плотности потока частиц, прошедших через препятствие, к модулю плотности потока падающих частиц:

$$D = \frac{J_{\text{пр}}}{J_{\text{пад}}}. \quad (16.40)$$

В классической физике плотность потока частиц с одинаковой скоростью v выражается произведением концентрации частиц n на скорость v :

$$\mathbf{j} = n\mathbf{v}. \quad (16.41)$$

Согласно квантовой теории, концентрация частиц определяется пространственным распределением плотности вероятности и, следовательно, выражается через квадрат модуля волновой функции частицы: $n = |\Psi|^2$. Скорость частицы может быть выражена через её импульс p и, согласно гипотезе де Бройля, через волновой вектор де Бройля:

$$\mathbf{v} = \frac{\mathbf{p}}{m} = \frac{\hbar \mathbf{k}}{m}. \quad (16.42)$$

Векторы плотности потока вероятности для падающей на яму и прошедшей через неё волны имеют вид (полагаем $A_1=1$):

$$|\mathbf{J}_{\text{пад}}| = \frac{\hbar k_1}{m}, \quad |\mathbf{J}_{\text{пр}}| = \frac{\hbar k_1}{m} |A_3|^2. \quad (16.43)$$

→ Коэффициент прохождения равен

$$D = \frac{|\mathbf{J}_{\text{пр}}|}{|\mathbf{J}_{\text{пад}}|} = |A_3|^2 = \left| \frac{4k_1 k_2 e^{-ik_1 a}}{(k_1 + k_2)^2 e^{ik_2 a} - (k_1 - k_2)^2 e^{-ik_2 a}} \right|^2. \quad (16.44)$$

Подставляя значения k_1 и k_2 из (16.31), после несложных преобразований получаем:

$$D = \left[1 + \frac{U_0^2 \sin^2 k_2 a}{4E(E - U_0)} \right]^{-1} = \left[1 + \frac{U_0^2}{4E(E - U_0)} \sin^2 \left(\frac{a\sqrt{2mE}}{\hbar} \right) \right]^{-1}. \quad (16.45)$$

→ Коэффициент прохождения D зависит от соотношения между энергией частицы E и глубиной потенциальной ямы U_0 и в общем случае оказывается меньше единицы.

С увеличением E коэффициент прохождения асимптотически стремится к единице.

Однако из-за наличия синусоидального фактора в (16.45) увеличение коэффициента D происходит немонотонно – при определенных энергиях частицы коэффициент прохождения становится аномально высоким или аномально низким. Данное явление, отсутствующее в классической физике рассеяния частиц, объясняется наличием у частицы волновых свойств.

При $\sin k_2 a = 0$ коэффициент прохождения D обращается в единицу, т.е. частица не испытывает отражения на границах ямы. Это условие (*резонансы прозрачности*) выполняется при $k_2 a = \pi n$, т.е. при значениях энергии частицы

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2, \quad (16.46)$$

где n – целые числа, при которых $E > U_0$.

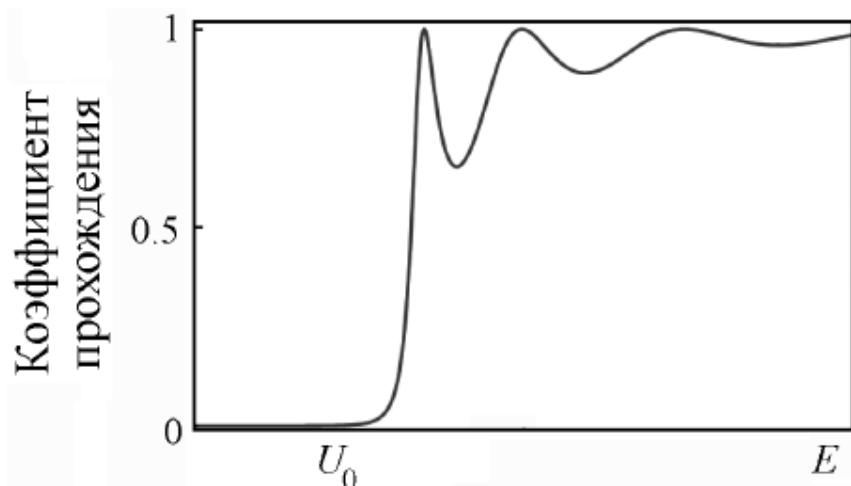
Энергию частицы, движущейся над потенциальной ямой, удобно отсчитывать не от дна ямы, а от её верхнего уровня U_0 , поскольку именно энергия $E' = E - U_0$ определяет кинетическую энергию частицы вдали от ямы. Переходя в (16.45), (16.46) от E к E' , получаем для коэффициента прохождения

$$D = \left[1 + \frac{U_0^2}{4E'(E' + U_0)} \sin^2 \left(\frac{a \sqrt{2m(E' + U_0)}}{\hbar} \right) \right]^{-1} \quad (16.47)$$

и резонансов прозрачности

$$E' = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2 - U_0, \quad (16.46a)$$

где n – целые числа, при которых $E' > 0$.



Условие $k_2 a = \pi n$ можно представить в виде

$$2a = \lambda_B n, \quad (16.48)$$

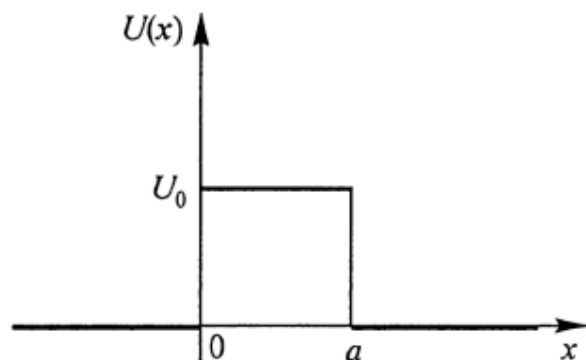
где λ_B – дебройлевская длина волны частицы внутри ямы. Это условие определяет гашение за счёт интерференции волн, отраженных от двух границ ямы.

Аналогичное эффекту Рамзауэра явление («просветление оптики») наблюдается в оптике и выражается в том, что тонкая плёнка определенной толщины не отражает световую волну определенной частоты. Нанесение такой плёнки на поверхность прозрачного оптического элемента, например, линзы, позволяет устранить нежелательное отражение световых волн при прохождении через него, что часто используется, например, в объективах.

Прохождение частицы сквозь потенциальный барьер

Рассмотрим прямолинейное 1D движение частицы в потенциальном поле, имеющем вид прямоугольной ступени (см. рисунок).

1. Рассмотрим случай, когда энергия частицы меньше высоты барьера ($E < U_0$).



КлМ: частица в точке $x = 0$ должна изменить импульс p на противоположный ($-p$) и уйти в направлении $x \rightarrow -\infty$. В область $x > 0$ классическая частица попасть не может.

КМ: есть ненулевая вероятность прохождения сквозь барьер (см. ниже).

Поведение частицы в КМ описывается решением уравнения Шредингера. Методика его решения – такая же, как в задаче о прохождении над потенциальной ямой.

Если энергию частицы отсчитывать от значения потенциала при $x \rightarrow \pm\infty$, то очевидно, что коэффициент прохождения барьера можно получить непосредственно из найденного ранее решения (16.47) для случая потенциальной ямы после замены $E' \rightarrow E$, $U_0 \rightarrow -U_0$. Поскольку в случае барьера при $E < U_0$ волновое число в подбарьерной области становится мнимым, вместо него введем действительную величину: $k_2 \rightarrow i\kappa$. В этом случае, согласно связи между тригонометрическими и гиперболическими функциями, функция $\sin(k_2x)$ заменится на $i \operatorname{sh}(\kappa x)$. Волновое число вне барьера обозначим как k .

Для коэффициента прохождения сквозь барьер таким образом получаем

$$D = \left[1 + \left(\frac{k^2 + \kappa^2}{2k\kappa} \right)^2 \operatorname{sh}^2(\kappa a) \right]^{-1}, \quad (16.49)$$

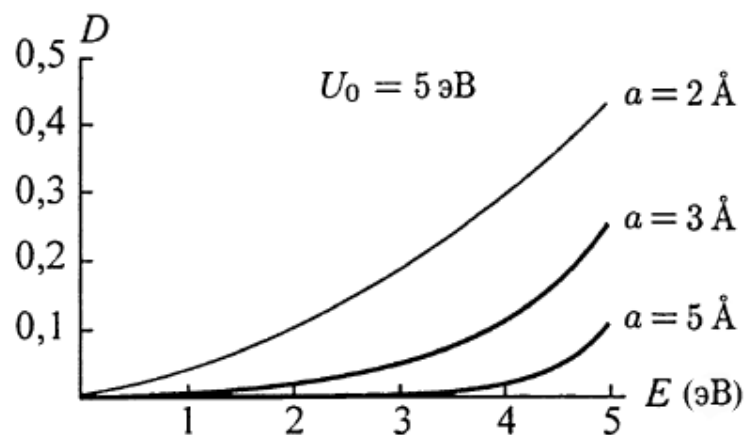
где

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad \kappa = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}, \quad (16.50)$$

или

$$D = \left[1 + \frac{U_0^2}{4E(U_0 - E)} \operatorname{sh}^2 \left(\frac{a\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar} \right) \right]^{-1}. \quad (16.51)$$

Как мы видим, даже при $E < U_0$ коэффициент прохождения барьера всегда отличен от нуля, что противоречит классическим представлениям. Этот эффект называется **туннелированием** сквозь барьер. Заметим, однако, что коэффициент прохождения всегда меньше единицы (не все частицы туннелируют).



При возрастании энергии частицы от нуля до U_0 коэффициент прохождения монотонно растет от нуля до максимального значения, которое можно найти, раскрывая в (16.51) неопределенность, возникающую при $E \rightarrow U_0$:

$$D(E = U_0) = \frac{1}{1 + mU_0 a^2 / 2\hbar^2}. \quad (16.52)$$

Если энергия частицы много меньше высоты барьера $E \ll U_0$, а его ширина достаточно велика, то справедливо неравенство $\kappa a \gg 1 \rightarrow$

$$D \approx \left(\frac{4k\kappa}{k^2 + \kappa^2} \right)^2 \exp(-2\kappa a) \quad (16.53)$$

или

$$D \approx \frac{4E(U_0 - E)}{U_0^2} \exp \left[-\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} \right]. \quad (16.54)$$

\rightarrow Вероятность прохождения через «широкий» потенциальный барьер ($\kappa a \gg 1$) экспоненциально уменьшается с ростом его ширины a .

2. Рассмотрим теперь случай, когда энергия частицы больше высоты барьера ($E > U_0$).

В этом случае рассмотрение задачи прохождения частицы практически идентично случаю рассеяния частицы потенциальной ямой, с точностью до замены $E \leftarrow U_0 \rightarrow E - U_0$. Соответственно, коэффициент прохождения определяется выражением

$$D = \left[1 + \frac{U_0^2}{4E(E - U_0)} \sin^2 \left(\frac{a\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar} \right) \right]^{-1}. \quad (16.55)$$

В отличие от случая классической частицы, которая замедляет свою скорость в области барьера, но тем не менее продолжает двигаться дальше в область за барьером, КМ решение показывает, что коэффициент прохождения зависит от энергии частицы и с её увеличением растёт от значения (16.52) до (в пределе $E \rightarrow \infty$) единицы, т.е. практически при любых конечных значениях E имеется отличная от нуля вероятность частичного отражения (такой эффект носит название *надбарьерного отражения*). Исключение составляют только некоторые значения энергий частицы, для которых наблюдается

полное прохождение ($D = 1$). При этих значениях энергии ($E = U_0 + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2$) аргумент

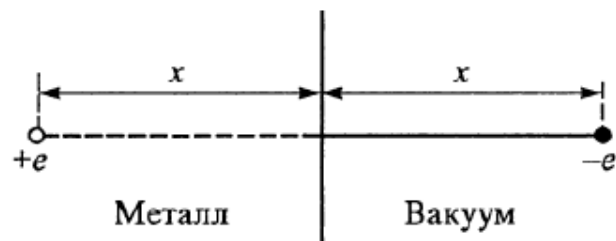
синуса в выражении для D (16.55) равен целому числу π (*резонансы прозрачности* барьера). Явление надбарьерного отражения является исключительно квантово-механическим, и связано оно с наличием у электрона волновых свойств.

Автоэлектронная эмиссия

Автоэлектронной эмиссией называют явление испускания электронов проводящими телами под действием внешнего электрического поля достаточно большой напряженности. В отличие от термоэлектронной эмиссии, когда эмиссионный ток возникает в результате нагрева поверхности и образования некоторой доли «горячих» электронов, способных преодолеть работу выхода и покинуть поверхность, автоэлектронная эмиссия не связана с нагревом поверхности и потому ещё называется холодной или полевой эмиссией. Явление автоэлектронной эмиссии было экспериментально обнаружено Р. Вудом в 1897 г., а в 1928–1929 г.г. Р. Фаулер и Л. Нордхейм предложили теоретическую модель, которая будет рассмотрена ниже.

Для осуществления холодной эмиссии вектор напряженности внешнего электрического поля \mathcal{E} должен быть направлен из окружающего пространства к поверхности металла. Тогда электрическое поле создаёт силу, приложенную к электрону проводимости, равную $F = -e\mathcal{E}$ и направленную изнутри металла к его поверхности. Можно предположить, что при достаточно большой силе F электрон проводимости может преодолеть потенциальный барьер, создаваемый ионами металла, благодаря чему возникнет эмиссионный ток с поверхности металла.

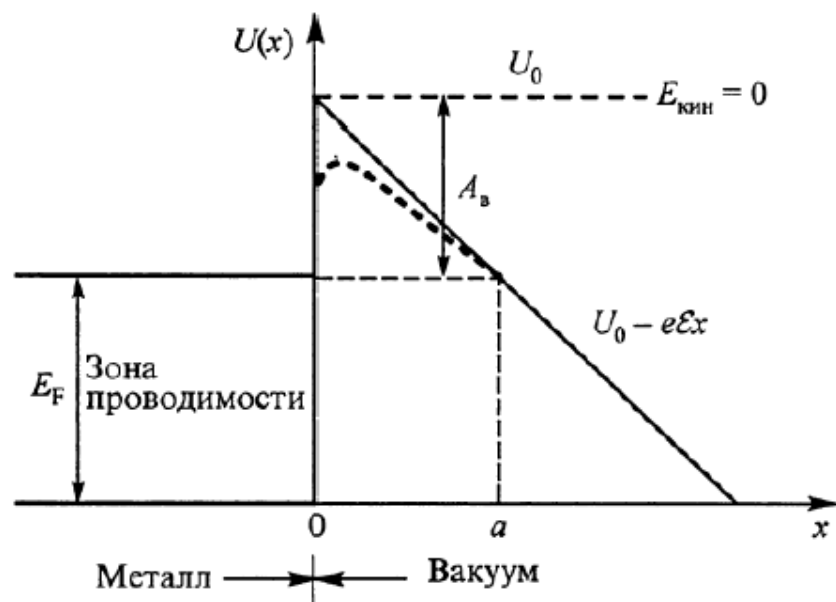
Для определения формы потенциального барьера на поверхности металла примем во внимание, что при удалении электрона в металле остаётся нескомпенсированный положительный электрический заряд $+e$, который взаимодействует с уходящим электроном.



→ **Сила электрического изображения** между электроном и «дыркой», направленная по нормали к поверхности металла. Результирующая сила равна

$$F(x) = e\mathcal{E} - \frac{e^2}{4x^2}, \quad (16.56)$$

где x – расстояние от электрона до поверхности металла.



Эффективная потенциальная энергия электрона:

$$U = U_0 - e\mathcal{E}x - \frac{e^2}{4x}. \quad (16.57)$$

→ При наложении внешнего электрического поля вместо прямоугольной потенциальной ступени возникает барьер треугольного профиля с закруглённой вершиной (из-за последнего слагаемого в (16.57)).

Приравниваем производную от (16.57) к нулю \rightarrow находим координату x_0 вершины барьера, препятствующего выходу электронов проводимости из металла:

$$x_0 = \frac{1}{2} \sqrt{e} \mathcal{E}^{-1/2}. \quad (16.58)$$

Подставляем в (16.57) \rightarrow максимальное значение потенциальной энергии:

$$U_m = U_0 - \sqrt{e^3} \mathcal{E}^{1/2}. \quad (16.59)$$

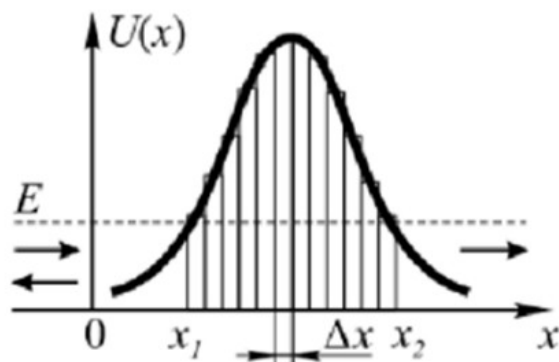
Из предыдущего рисунка видно, что электрон проводимости, обладающий максимально доступной энергией (E_F), должен для выхода из металла преодолеть потенциальный барьер высотой

$$A_B = \sqrt{e^3} \mathcal{E}^{1/2}. \quad (16.60)$$

(16.59), (16.60) \rightarrow С ростом напряжённости \mathcal{E} приложенного электрического поля потенциальный барьер понижается. При некотором значении \mathcal{E}_0 барьер должен исчезнуть и начаться эмиссия электронов из металла. Оценка согласно (16.60) \rightarrow значение \mathcal{E}_0 порядка 10^8 В/см. Пример: вольфрам, $A_B = 4.3$ эВ $\rightarrow \mathcal{E}_0 \approx 1.4 \times 10^8$ В/см. Однако, согласно опытам Милликена, заметный ток холодной эмиссии наблюдается уже при $\mathcal{E}_0 \sim 10^6$ В/см, т.е. при полях на два порядка меньше.

Согласие с результатами экспериментов достигается, если предположить, что холодная эмиссия возникает благодаря туннельному эффекту.

Ранее мы получили формулу для коэффициента прохождения через прямоугольный барьер. Эту формулу можно обобщить на случай потенциального барьера произвольного вида.



Представим потенциальный барьер в виде суперпозиции n тонких прямоугольных барьеров высотой $U(x)$ с шириной Δx . Частицы последовательно просачиваются через эти барьеры. Вероятность проникновения частиц через общий барьер будет равна произведению вероятностей прохождения через каждый из прямоугольных барьеров. Соответственно, общий коэффициент прозрачности равен произведению коэффициентов прохождения через последовательность узких барьеров.

В силу малой толщины барьеров можем перейти к пределу $\Delta x \rightarrow dx$. В случае барьера, рассматриваемого нами в задаче об автоэлектронной эмиссии, при напряженности поля, значительно меньшей критического значения \mathcal{E}_0 , можно воспользоваться приближенной формулой (16.54) для высокого барьера. В этом случае произведение экспонент преобразуется в экспоненту с показателем в виде суммы, которая в пределе $\Delta x \rightarrow dx$ заменяется интегралом \rightarrow

$$D = \frac{j_{np}}{j_{nad}} = D_1 \times D_2 \times \dots \times D_n \times D_{n-1} = D_0 \exp \left(-\frac{2}{h} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(U(x) - E)} dx \right). \quad (16.61)$$

Интегрирование в нашем случае проводится от нуля до точки d , положение которой зависит от энергии E туннелирующего электрона и определяется уравнением

$$U(x = d) = E. \quad (16.62)$$

Пренебрегая последним слагаемым $(-e^2/4x)$ в (16.57), что незначительно повлияет на окончательный результат, получим

$$d = \frac{(U_0 - E)/e}{\mathcal{E}}. \quad (16.63)$$

Вычисление интеграла (16.61) (в пренебрежении $-e^2/4x$) даёт коэффициент прохождения

$$D = D_0 \exp \left[-\frac{4(U_0 - E)^{3/2}}{3e\hbar\mathcal{E}} \sqrt{2m} \right] \sim \exp \left(-\frac{\mathcal{E}_m}{\mathcal{E}} \right), \quad (16.64)$$

где \mathcal{E}_m - константа, зависящая от работы выхода данного металла.

Плотность тока автоэмиссии j пропорциональна коэффициенту прохождения \rightarrow

$$j = j_0 \exp \left(-\frac{\mathcal{E}_m}{\mathcal{E}} \right). \quad (16.65)$$

Экспоненциальная зависимость тока (16.54) от ширины барьера лежит в основе принципа работы сканирующего туннельного микроскопа.