

Элементы квантовой механики

(продолжение 2)

Простейшие задачи

Сейчас мы познакомимся с решением нескольких простейших стационарных задач квантовой механики,¹ Поскольку эти задачи в основном одномерные, то заготовим стационарное уравнение Шредингера для одномерного случая в стандартной форме. Исходное уравнение имеет вид

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x)$$

или

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + U(x)\right)\psi(x) = E\psi(x).$$

Преобразуем к стандартной форме

$$\psi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(x))\psi(x) = 0. \quad (1)$$

Все готово, но сначала нам придется обратиться к классической механике, чтобы лучше понять постановку решаемых квантово-механических задач. Вообще, надо иметь в виду, что решить квантово-механическую задачу подчас проще, чем понять, что это решение значит.

Одномерное
стационарное
уравнение
Шредингера

Классический анализ потенциальных кривых

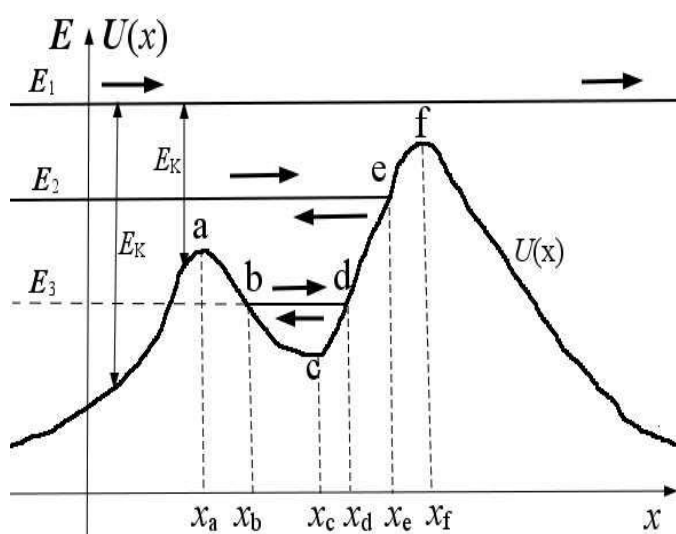
Я напомним, как анализируется качественно в простейшем одномерном случае движение материальной точки при заданной потенциальной энергии.

Посмотрим на [рисунок](#). По оси абсцисс откладывается x -координата материальной точки, а по оси ординат – ее полная энергия E и потенциальная энергия $U(x)$, изображенная корявой кривой². Мы считаем, что полная энергия сохраняется, поэтому ее значения представляют прямые линии (или их отрезки), параллельные оси абсцисс.

¹ Мы знаем, как потом построить полное решение.

² Почему «корявой», я надеюсь, понятно всем, кто читал лекции прошлого семестра.

Основой для качественного анализа служит соотношение между силой F , действующей на материальную точку, и потенциальной энергией¹



$$F = -\frac{dU(x)}{dx}. \quad (2)$$

Эта сила обращается в ноль вместе с производной от потенциальной энергии, т.е., в частности, в точках минимума (точка c с координатой x_c) и максимума (точки a

и f с координатами соответственно x_a и x_f) потенциальной энергии. Эти точки – точки равновесия. Легко убедиться, что вблизи точки минимума сила направлена к этой точке (*возвращающая* сила), так что речь идет об устойчивом равновесии, а вблизи точки максимума – наоборот, и равновесие в ней неустойчиво.

Кинетическая энергия E_K есть разность между полной и потенциальной энергиями:

$$E_K(x) = E - U(x),$$

и, конечно, должна быть неотрицательна, так что

$$E - U(x) \geq 0.$$

Сначала проследим за частицей² с наибольшей полной энергией E_1 , летящей в положительном направлении оси x (направления движения на рисунке показаны стрелочками). По мере приближения ее к «вершине», к точке a , кинетическая энергия уменьшается, частица как бы взбирается в гору. Эта гора называется *потенциальным барьером*. Полной энергии оказывается достаточно, чтобы преодолеть вершину, после чего кинетическая энергия возрастает – частица «скатывается с горки». Впереди еще один барьер, а между барьерами – *потенциальная яма*. Кинетическая энергия максимальна над точкой c минимума потенциальной энергии. Полет над ямой заканчивает

¹ Мы не пишем частную производную, потому что для простоты считаем движение существенно одномерным – вдоль оси x .

² Частица в роли материальной точки.

прохождением *над* вторым барьером, и частица беспрепятственно улетает с все возрастающей скоростью. Такое неограниченное движение называется *инфинитным*.

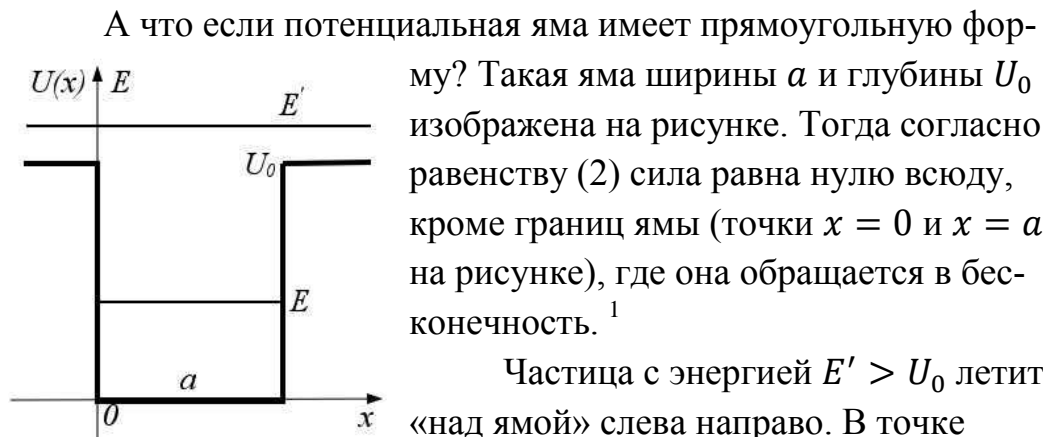
Сначала и для второй частицы (с энергией E_2) все складывается благополучно: она проходит над первым барьером и радуется жизни над потенциальной ямой. Однако, взбираясь на вторую гору, она обессиливает: ее кинетическая энергия обращается в ноль в точке e . Ей приходится остановиться и начать движение в обратном направлении, лететь назад с увеличивающейся скоростью или скатываться с горки, поскольку *под* барьером она жить не может (кинетическая энергия была бы отрицательна).

А вот третьей частице (E_3) не позавидуешь. Она находится в *потенциальной яме*, мечется взад-вперед между точками b и d , совершая *финитное* движение. В частности, если вблизи точки минимума вторая производная потенциальной энергии не обращается в ноль и можно пренебречь в разложении в ряд Тейлора дальнейшими членами, т.е.

$$U(x) \approx U_0 + \frac{k(\Delta x)^2}{2},$$

где $k = \frac{d^2 U(x_c)}{dx^2}$, $\Delta x = x - x_c$, то речь идет о квазиупругой силе. Частица с массой m при этом совершает гармонические колебания с частотой $\omega = \sqrt{k/m}$. Вспомнили?

Прямоугольная бесконечно глубокая потенциальная яма



¹ Все происходит в невесомости.

$x = 0$ каким-то внезапным щелчком ей сообщается дополнительная скорость, резко увеличивается ее кинетическая энергия. Вплоть до точки $x = a$ ничто не меняется, а затем так же происходит мгновенное (помните, «в физическом смысле») торможение до начальной скорости. Это торможение как раз понять легко: частица ударяется о стенку и пробивает ее, теряя энергию. А в точке $x = 0$, если угодно, сработала «антистенка».

Частица с энергией $E < U_0$ заточена в яме. Она летает от стенки к стенке, но пробить их не может (все удары – упругие, так что полная энергия не изменяется).¹ Чтобы освободить узницу, нужно сообщить дополнительную энергию, большую чем $U_0 - E$. А если глубина ямы бесконечная, $U_0 = \infty$, то пробить стенки не удастся никогда - они становятся непроницаемыми.

Именно такую задачу мы сейчас и рассмотрим с точки зрения квантовой механики.

Итак, потенциальная энергия для уравнения Шредингера (1) имеет вид

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0 \\ 0, & 0 < x < a \\ \infty, & x > a, \end{cases}$$

Вне ямы уравнению Шредингера (1) можно удовлетворить, только если $\psi(x) = 0$, а внутри ямы, когда $0 < x < a$ и $U(x) = 0$, это уравнение принимает вид

$$\psi''(x) + k^2\psi(x) = 0,$$

где

$$k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}. \quad (3)$$

Его общее решение выглядит так:³

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

Осталось удовлетворить условиям, накладываемым на ψ -функцию. В данном случае (поскольку потенциальная энергия терпит разрыв второго рода на краях ямы) достаточно обеспечить непрерывность самой ψ -функции в точках $x = 0$ и $x = a$.

Уравнение Ш.
внутри ямы

¹ Импульс силы $Fdt = 2p$ при этом, очевидно, конечен.

² Поскольку полная энергия в нашем случае равна кинетической энергии, то это соотношение имеет очень простой смысл: $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{p^2}{2m}$.

³ Это редкий случай, когда решение удобно представить в таком виде, а не в комплексной форме (см., например, (17)).

Слева от точки $x = 0$ ψ -функция равна нулю, поэтому и справа должно $\psi(0) = 0$, откуда следует, что коэффициент $B = 0$ и

$$\psi(x) = A \sin(kx). \quad (4)$$

Аналогично, функция (4) должна ради непрерывности обращаться в ноль и в точке $x = a$, что приводит к условию

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

Значение $n = 0$ обращало бы функцию (4) в тождественный ноль¹, а отрицательные n не приводят к новым состояниям согласно постулату о квантовых состояниях (умножение на числа).

Мы видим, что допустимы лишь дискретные значения k , которые мы проиндексируем целой переменной n :

$$k_n = \pi n / a. \quad (5)$$

Допустимые k

Равенство (3) позволяет получить и стационарные значения энергии – собственные значения гамильтониана:

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2}. \quad (6)$$

Стационарные уровни энергии

Перепишем и ψ -функции (4):

$$\psi_n(x) = A \sin(\pi n x / a),$$

нормируем их, т.е. потребуем, чтобы²

$$\int_0^a |\psi(x)|^2 dx = 1,$$

или

$$A^2 \int_0^a \sin^2(\pi n x / a) dx = 1.$$

Вычисляем интеграл³ и радостно обнаруживаем, что $A = \sqrt{2/a}$, так что нормированные ψ -функции имеют вид

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(\pi n x / a). \quad (7)$$

Нормированные ψ -функции

Функции (7) получились такими же, как если бы мы решали задачу о стоячих волнах в струне с зажатými концами.

Пришло время обсудить то, что у нас получилось. Во-первых, спектр собственных значений оператора полной энергии оказался дискретным (6). Это означает, что при измерениях может получаться значение полной энергии только из этого набора. Запомним, что всегда, когда речь идет о финитном

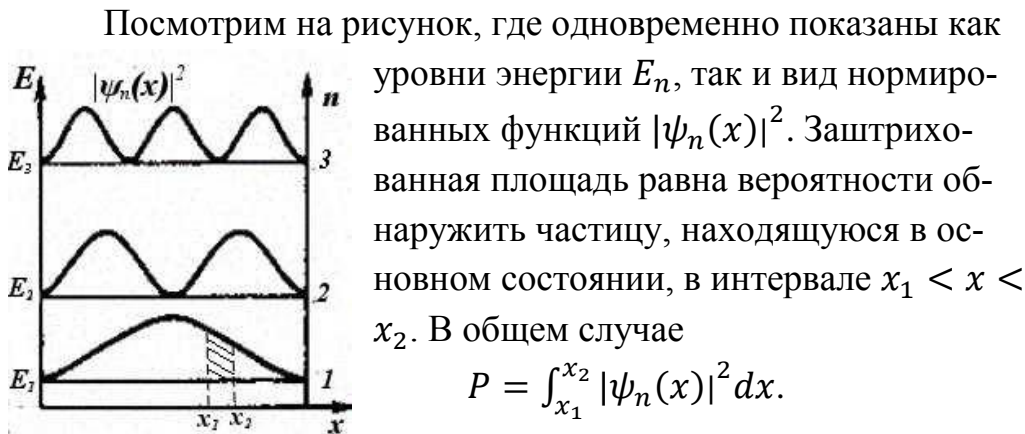
¹ Если $\psi(x) = 0$ всюду, то *нигде* нельзя найти частицу, т.е. ее просто нет.

² $\psi(x) = 0$ вне интервала $0 < x < a$.

³ Лучше всего, по формуле $\frac{1}{T} \int_0^T \sin^2(\omega t) dt = 1/2$.

движении – говорят, частица находится **в связанном состоянии** – уровни энергии дискретны. Число n , нумерующее состояние называется *квантовым* числом. Ему соответствует число максимумов функции $|\psi_n(x)|^2$. Это тоже общий принцип: число узлов ψ -функции всегда определяется квантовым числом.¹

Квантовые числа



«Движение частицы» совсем не похоже на ее классическое движение. При $n > 1$ плотность вероятности обнаружения частицы может обращаться в ноль и не на краях ямы, т.е. частица как бы вообще не бывает в этих точках.

Вероятность обнаружить частицу в заданном интервале

Функции (7) **не являются** собственными функциями оператора импульса,² поэтому импульс не принимает определенного значения в соответствующих состояниях.

На первый взгляд кажется, что оператор \hat{p} коммутирует с гамильтонианом нашей задачи (ну, поскольку $U(x) = 0$). Однако надо смотреть соотношение коммутации на всей оси x , а на границах ямы есть скачок, в результате которого порядок умножения на функцию $U(x)$ и дифференцирования оказывается существенным. Напомню, что производная ступеньки приводит к δ -функции.

Собственные функции оператора \hat{p}_x легко находятся из уравнения

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi_p(x) = p \psi_p(x),$$

так что

$$\psi_p(x) = A e^{ipx/\hbar}$$

есть собственная функция, принадлежащая собственному значению p .

Поскольку $\sin\left(\frac{\pi n x}{a}\right) = \frac{1}{2i} (e^{i\frac{\pi n x}{a}} - e^{-i\frac{\pi n x}{a}})$, то состояние (7) есть равновероятная суперпозиция состояний, соответствующих импульсам $\pm \hbar \frac{\pi n}{a}$

¹ В других задачах эти величины могут отличаться на единицу-другую – все определяется тем, с какого значения начинается последовательность квантовых чисел.

² Иными словами, величины $p_n = \hbar k_n = \hbar \pi n / a$ представляют собой лишь часть всех собственных значений оператора импульса. Импульс, как и координата, вообще никогда не квантуется.

(туда-сюда). Определить, однако, в каком направлении движется частица одновременно с измерением полной энергии, невозможно.

Классической механике соответствуют очень большие значения квантового числа n . Пусть, например, шарик массы $m = 1\text{г}$ летает со скоростью $v = 0,3\text{м/с}$ между двумя стенками на расстоянии $a = 10\text{см}$. Приравнявая значение (6) классической энергии, имеем

$$\frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2} = \frac{mv^2}{2},$$

т.е.

$$n = \frac{mva}{\hbar\pi} \sim 10^{29}.$$

Относительная разность энергий двух ближайших уровней

$$\frac{E_{n+1} - E_n}{E_n} = \frac{2n+1}{n^2}$$

при этом оказывается чрезвычайно малой, и любому макроскопическому измерению энергии соответствует очень большое количество неразличимых уровней (6).

При появлении новой теории всегда должна быть некоторая преемственность. Например, специальная теория относительности переходит в классическую механику, когда все скорости задачи существенно меньше скорости света. Для квантовой механики за такую преемственность отвечает *принцип соответствия*: результаты квантовой механики должны переходить в классические при больших квантовых числах ($n \rightarrow \infty$). Проследим действие принципа соответствия на примерах.

Принцип соответствия

Вычислим некоторые средние значения. Начнем с координаты x .

$$\langle x \rangle = (\psi_n(x), \hat{x}\psi_n(x)) = \frac{2}{a} \int_0^a x \sin^2\left(\frac{\pi nx}{a}\right) dx = a/2. \quad (8) \quad \langle x \rangle$$

Так бы получилось, понятно, и в классической механике.

Вычислим среднее значение импульса (в нашей одномерной задаче импульс сводится к его проекции на ось Ox):

$$\langle p \rangle = \frac{2}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{\pi nx}{a}\right) \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \sin\left(\frac{\pi nx}{a}\right) dx = 0. \quad (9) \quad \langle p \rangle$$

Ясно, что так оно есть и в классической механике: ведь частица летает туда-сюда.

Это проявление принципа соответствия: если у квантовой задачи есть классический аналог, то средние значения – это то, что их связывает прежде всего.

Вычислим еще среднее значение квадрата координаты в n -том стационарном состоянии

$$\langle x^2 \rangle_n = \frac{2}{a} \int_0^a x^2 \sin^2\left(\frac{\pi nx}{a}\right) dx = a^2 \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi^2 n^2}\right) \quad (9) \quad \langle x^2 \rangle_n$$

и дисперсию

$$D_{x,n} = \langle x^2 \rangle_n - \langle x \rangle^2 = \frac{a^2}{12} \left(1 - \frac{6}{\pi^2 n^2}\right) \quad (10)$$

Классические значения этих величин равны соответственно $a^2/3$ и $a^2/12$, что практически совпадает с (9) и (10) при больших значениях квантового числа n . (Мы уже видели, что значения n действительно очень велики в классических задачах).

Обратимся к среднему значению квадрата импульса.

$$\langle p^2 \rangle = \frac{2}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{\pi nx}{a}\right) (-\hbar^2) \frac{d^2}{dx^2} \sin\left(\frac{\pi nx}{a}\right) dx = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{a^2}. \quad (11) \quad \langle p^2 \rangle$$

Это среднее значение зависит от квантового числа n . Поскольку $\langle p \rangle = 0$, то дисперсия импульса есть

$$D_{p,n} = \langle p^2 \rangle = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{a^2}.$$

Среднеквадратические отклонения выглядят так

$$\Delta x = \sqrt{D_{x,n}} = \frac{a}{3\sqrt{2}} \sqrt{\left(1 - \frac{6}{\pi^2 n^2}\right)},$$

$$\Delta p = \sqrt{D_{p,n}} = \hbar \pi n / a.$$

Можно условно сказать, величина Δp как раз соответствует изменению направления движения на противоположное.

Мы видим, что

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2} \sqrt{\frac{\pi^2 n^2}{3} - 2}.$$

Для основного состояния ($n = 1$) получается $\Delta x \Delta p \approx 0,57\hbar$.

Рассмотренную задачу легко распространить на двумерную и трехмерную прямоугольную яму. Здесь мы остановимся только на трехмерном случае,² когда движение частицы ограничено ящиком в форме прямоугольного параллелепипеда со сторонами a_1, a_2 и a_3 вдоль осей x, y и z соответственно. Потенциальная энергия $U(x, y, z)$ равна нулю внутри ящика, т.е. когда $0 < x < a_1, 0 < y < a_2$ и $0 < z < a_3$, и бесконечна вне его, что в этой области приводит к обращению ψ -функции в ноль.

Стационарное уравнение Шредингера внутри ямы

Трехмерная бесконечно глубокая яма – ящик с непроницаемыми стенками

¹ Это среднее можно получить и проще: поскольку $U(x) = 0$, то $\langle p^2 \rangle = 2mE_n$.

² Задача о двумерной яме еще проще.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z)$$

легко решается методом разделения переменных. Для этого следует положить

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

подставить в уравнение, поделить на $\psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z)$ и чуть-чуть подумать. Тогда уравнение Шредингера распадется на три уравнения

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_1(x)}{\partial x^2} = E_1\psi_1(x),$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_2(y)}{\partial y^2} = E_2\psi_2(y),$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_3(z)}{\partial z^2} = E_3\psi_3(z),$$

которые не отличаются от уравнения для одномерной ямы, с дополнительным условием

$$E_1 + E_2 + E_3 = E.$$

. Поэтому ψ -функция оказывается зависящей от трех квантовых чисел¹ n_1, n_2 и n_3 и после нормировки выглядит так:

$$\psi_{n_1, n_2, n_3}(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{a_1 a_2 a_3}} \sin\left(\frac{\pi n_1 x}{a_1}\right) \cdot \sin\left(\frac{\pi n_2 y}{a_2}\right) \cdot \sin\left(\frac{\pi n_3 z}{a_3}\right). \quad (12)$$

Полная энергия есть² сумма энергий движения вдоль осей x, y и z :

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2 n_1^2}{2m a_1^2} + \frac{\hbar^2 \pi^2 n_2^2}{2m a_2^2} + \frac{\hbar^2 \pi^2 n_3^2}{2m a_3^2}. \quad (13)$$

Таким образом, движение вдоль этих осей оказывается независимым, как и в классической механике. Об этом же свидетельствует и тот факт, что вероятность обнаружить частицу в объеме $dV = dx dy dz$ равна произведению вероятностей обнаружить ее в пределах dx, dy и dz :

$$dP = \left(\frac{2}{a_1} \sin^2\left(\frac{\pi n_1 x}{a_1}\right) dx\right) \cdot \left(\frac{2}{a_2} \sin^2\left(\frac{\pi n_2 y}{a_2}\right) dy\right) \cdot \left(\frac{2}{a_3} \sin^2\left(\frac{\pi n_3 z}{a_3}\right) dz\right). \quad (14)$$

Пусть наша яма – кубическая, т.е. $a_1 = a_2 = a_3 = a$.

Тогда

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2 (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)}{2m a^2}. \quad (15)$$

Многие из уровней энергии (15) *вырождены*, т.е. к одной энергии приводит более чем одно состояние. Возьмем, например,

ψ -функция
трехмерной
ямы

Уровни энергии в трех-
мерной яме

Вырождение
уровней

¹ Все эти квантовые числа независимо принимают значения 1, 2, 3, ...

² Так получается, поскольку $U(x, y, z) = 0$.

значения квантовых чисел $n_1 = 1, n_2 = 2$ и $n_3 = 3$. Такое состояние имеет энергию

$$E_{1,2,3} = \frac{7\hbar^2\pi^2}{ma^2}. \quad (16)$$

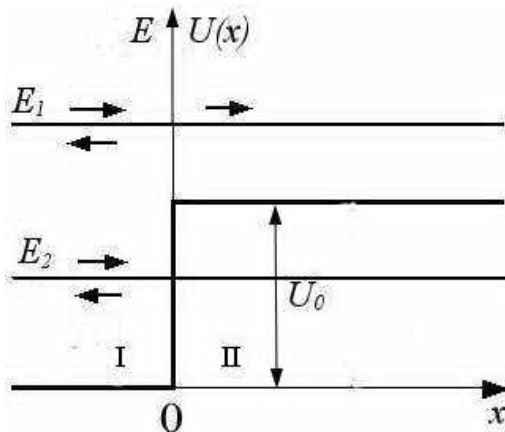
Но такую же энергию имеет и состояние с квантовыми числами $n_1 = 2, n_2 = 1$ и $n_3 = 3$. Всего можно указать 6 перестановок, определяющих энергию (16) и *разные* состояния.¹ Говорят, что этот энергетический уровень *имеет кратность вырождения, равную 6*.²

Кратность
вырождения

Не вырожден основной уровень ($n_1 = 1, n_2 = 1, n_3 = 1$), как и вообще все уровни кубической ямы с одинаковыми квантовыми числами ($n_1 = n_2 = n_3$). А какова кратность вырождения уровня, для которого ровно два квантовых числа совпадают?

Потенциальная ступенька

Потенциальная ступенька – это бесконечно длинный прямоугольный барьер. Для классической частицы такая картинка



описывает ее столкновение со стенкой (расположенной при $x = 0$): если энергия E (на рис. обозначена E_1) больше высоты ступеньки U_0 , то частица пробивает стенку, теряя кинетическую энергию,³ в противном случае (на рис. E_2) – отражается.

Перейдем к квантовомеханическому рассмотрению такой задачи. Как всегда, решать уравнение Шредингера надо в областях гладкости потенциальной энергии. В данном случае это область I ($x < 0$) и область II ($x > 0$). На втором этапе полученные решения необходимо сшить – потребовать непрерывности функции

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_1(x), & x < 0 \\ \psi_2(x), & x > 0. \end{cases}$$

¹ Ведь $\sin(x) \sin(2y)$ и $\sin(2x) \sin(y)$ не одно и то же! А разные ψ -функции задают разные состояния.

² Этот тип вырождения связан с симметрией задачи, в дальнейшем мы встретимся и с вырождением другого рода.

³ Как и раньше, считаем, что первоначально частица летит в положительном направлении оси x (слева направо на рисунке)

в точке $x = 0$.

Нам придется рассмотреть два случая.

1. Энергия набегающих «слева» частиц больше высоты ступеньки, $E > U_0$.¹

$E > U_0$

В таких случаях говорят о «низком барьере». Полагая в уравнении (1) для области I $U(x) = 0$, получаем уравнение

$$\psi_1''(x) + k_1^2 \psi_1(x) = 0$$

с общим решением

$$\psi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}, \quad (17)$$

ψ -функция I

где $k_1 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}$.

Аналогично, для области II имеем $U(x) = U_0$,

$$\psi_2''(x) + k_2^2 \psi_2(x) = 0,$$

$$\psi_2(x) = A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x}, \quad (18)$$

ψ -функция II

где $k_2 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - U_0)}$.

Что это все такое? Сначала вспомним, что мы нашли только ψ -функции состояний с определенной энергией, чтобы получить волновые функции их надо умножить на $e^{-i\frac{E}{\hbar}t} = e^{-i\omega t}$. Становится ясно, что оба решения (17) и (18) – суммы плоских монохроматических волн, бегущих в положительном (первое слагаемое) и отрицательном (второе слагаемое) направлении оси x .

Таким образом, над ступенькой набегающая волна, описывающая частицы, частично проходит дальше, а частично отражается. Что в такой ситуации может нас еще интересовать? Ну, конечно, коэффициенты отражения и прохождения. Поток электронов, набегающих слева в области I, мы готовим сами, так что коэффициент A_1 можно считать известным. Далее заметим, что частицам, летящим справа налево в области II, просто неоткуда взяться.² Поэтому $B_2 = 0$.

Теперь берем иголку и нитку. Во-первых, нам надо сшить в точке $x = 0$ функции ψ_1 и ψ_2 , т.е. потребовать, чтобы выполнялось равенство

$$\psi_1(0) = \psi_2(0). \quad (19)$$

Сшивки

Во-вторых, нужно сшить в этой точке и производные:³

¹ Не будем писать у энергии E лишние индексы, оставим их только на рисунке.

² Это хоть и квантовая механика, но все должно быть разумно.

³ Сначала дифференцируем, а потом подставляем $x = 0$. Мне пришлось писать отзыв на диссертацию, в которой (правда, в другой, более запутанной ситуации) было сделано как раз наоборот. Все константы при дифференцировании обнулились, и получилось «открытие».

$$\psi_1'(0) = \psi_2'(0). \quad (20)$$

Сшивка
производных

Получается так:

$$\begin{aligned} A_1 + B_1 &= A_2, \\ k_1 A_1 - k_1 B_1 &= k_2 A_2. \end{aligned}$$

Решаем эту систему уравнений:

$$\begin{aligned} B_1 &= \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} A_1, \\ A_2 &= \frac{2k_1}{k_1 + k_2} A_1. \end{aligned}$$

Плотность вероятности обнаружения частицы задается квадратом модуля ψ -функции, поэтому коэффициентом отражения разумно назвать величину

$$R = |B_1/A_1|^2 = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2. \quad (21)$$

Коэффициент
отражения

Этот результат верен, но если так же поступить для коэффициента прохождения, то сумма этих коэффициентов не будет равна единице! Дело заключается в том, что нужно использовать не плотность вероятности обнаружить частицу, а плотность потока этой вероятности. Плотность потока, как мы помним, всегда получается из плотности умножением на скорость. Попробуем сделать так:¹ $v = \frac{p}{m} = \frac{\hbar k}{m}$. Тогда для коэффициента прохождения получаем

$$D = \frac{k_2}{k_1} |A_2/A_1|^2 = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}. \quad (22)$$

Коэффициент
прохождения

Теперь все в порядке: $R + D = 1$.

Подведем итог. Во-первых, система уравнений (19) и (20) имеет решение при любых значениях энергии E , так что спектр энергий частицы непрерывен (пока мы рассматриваем случай $E > U_0$, но этот вывод останется справедливым и при $E < U_0$ ²). Во-вторых, при прохождении частицы над барьером есть вероятность (21), что она отразится! Это так называемое *надбарьерное отражение*. Частицу, подлетающую к стенке, которую она может пробить, одолевают угрызения совести, и с некоторой вероятностью она может повернуть назад. А в макромире так бывает?

2. Энергия набегающих «слева» частиц меньше высоты ступеньки, $E < U_0$.

$E < U_0$

В такой ситуации говорят о *высоком барьере*.

¹ Честное вычисление плотности потока вероятности см., например, в учебнике Л.К. Мартинсона и Е.В. Смирнова.

² Кстати, а что будет, если $E = U_0$?

В области I ($x < 0$) ничто не меняется (см. (17)), а в области II ($x > 0$) коэффициент k_2 оказался бы мнимым, поэтому мы введем новое обозначение

$$\kappa_2 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}.$$

Тогда уравнение Шредингера (1) в этой области принимает вид

$$\psi_2''(x) - \kappa_2^2 \psi_2(x) = 0,$$

а его решение –

$$\psi_2(x) = A_2 e^{\kappa_2 x} + B_2 e^{-\kappa_2 x}. \quad (23)$$

Поскольку ψ -функция должна быть ограниченной, то первое слагаемое не годится ($e^{\kappa_2 x} \rightarrow \infty$ при $x \rightarrow +\infty$),¹ так что

$$\psi_2(x) = B_2 e^{-\kappa_2 x}.$$

Сшиваем (см. (19) и (20)):

$$\begin{aligned} A_1 + B_1 &= B_2, \\ ik_1 A_1 - ik_1 B_1 &= -\kappa_2 B_2, \end{aligned}$$

откуда²

$$\begin{aligned} B_1 &= \frac{k_1 - i\kappa_2}{k_1 + i\kappa_2} A_1, \\ B_2 &= \frac{2k_1}{k_1 + i\kappa_2} A_1. \end{aligned}$$

Вычисляем коэффициент отражения³

$$R = |B_1/A_1|^2 = 1.$$

Это значит, что никаких чудес не происходит, частица неминуемо отражается от высокой потенциальной ступеньки. Однако плотность вероятности обнаружения частица внутри ступеньки отлична от нуля,⁴ хотя и быстро уменьшается по мере удаления от границы ступеньки:

$$|\psi_2(x)|^2 = A_1^2 \frac{4k_1^2}{k_1^2 + \kappa_2^2} e^{-2\kappa_2 x}. \quad (24)$$

Частица как бы заглядывает за барьер, видит там беспросветную тьму и поворачивает обратно. А что если она увидит свет в конце туннеля? Об этом пойдет речь в следующем параграфе.

Все, о чем мы сейчас говорили, есть проявление волновых свойств частицы. В оптике есть аналогичное явление полного внутреннего отраже-

ψ -функция под ступенькой

Плотность вероятности обнаружения частицы под ступенькой

¹ Напомню, что функция $\psi_2(x)$ получена для области $x > 0$.

² Если у вас получилось $\frac{ik_1 + \kappa_2}{ik_1 - \kappa_2}$, то это же самое: просто умножьте на $-i$.

³ Впрочем, здесь и вычислять нечего: для дроби $\frac{k_1 - i\kappa_2}{k_1 + i\kappa_2}$ сопряженная знаменателю величина равна числителю, а числителю – равна знаменателю, так что все сокращается.

⁴ Не могу не отметить, что отношение *вероятностей* найти частицу внутри / вне ступеньки равно нулю.

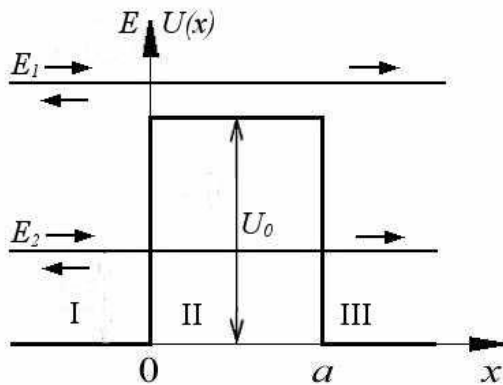
ния от оптически менее плотной среды при достаточно больших углах падения. Световое поле при этом тоже проникает во вторую среду и экспоненциально убывает по мере удаления от границы раздела. Отсюда следует предварительный ответ на только что поставленный вопрос. Пусть свет испытывает полное внутреннее отражение на границе стеклянной пластинки с воздухом. Если к первой пластинке параллельно приблизить вторую стеклянную пластинку, то при достаточно малом расстоянии между пластинками во второй из них появится луч света, хотя и более слабый.

Такие же эффекты можно наблюдать и с другими волнами, например, на луже, покрытой бензиновыми пятнами. Можете попробовать сами.

Прямоугольный барьер конечной длины

Эта задача вполне аналогична рассмотренной в предыдущем параграфе. Потенциальная энергия записывается так:

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ U_0, & 0 < x < a \\ 0, & x > a, \end{cases}$$



Нужно решать стационарное уравнение Шредингера в трех областях: I ($x < 0$), II ($0 < x < a$) и III ($x > a$), рассматривая отдельно случаи низкого ($E > U_0$) и высокого ($E < U_0$) барьера. Хотя все необходимые решения уже получены (см. (17) и (23)), выпишем их для удобства и здесь.

$$\begin{aligned} x < 0: \quad \psi_1(x) &= A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}, \\ 0 < x < a: \quad \psi_2(x) &= \begin{cases} A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x}, & E > U_0 \\ A_2 e^{\kappa_2 x} + B_2 e^{-\kappa_2 x}, & E < U_0, \end{cases} \\ x > a: \quad \psi_3(x) &= A_3 e^{ik_1 x}. \end{aligned}$$

Здесь

$$k_1 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}, \quad k_2 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - U_0)}, \quad \kappa_2 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}. \quad (25)$$

Сшиваем ψ -функции в точках $x = 0$ и $x = a$.

1. Низкий барьер, $E > U_0$

$$\begin{aligned} A_1 + B_1 &= A_2 + B_2, \\ k_1 A_1 - k_1 B_1 &= k_2 A_2 - k_2 B_2, \\ A_2 e^{ik_2 a} + B_2 e^{-ik_2 a} &= A_3 e^{ik_1 a}, \\ A_2 k_2 e^{ik_2 a} - B_2 k_2 e^{-ik_2 a} &= A_3 k_1 e^{ik_1 a}. \end{aligned}$$

2. Высокий барьер, $E < U_0$

$$A_1 + B_1 = A_2 + B_2,$$

$$ik_1 A_1 - ik_1 B_1 = \kappa_2 A_2 - \kappa_2 B_2,$$

$$A_2 e^{\kappa_2 a} + B_2 e^{-\kappa_2 a} = A_3 e^{ik_1 a},$$

$$A_2 \kappa_2 e^{\kappa_2 a} - B_2 \kappa_2 e^{-\kappa_2 a} = A_3 ik_1 e^{ik_1 a}.$$

Надо много попотеть, чтобы решить эти уравнения.¹

В случае низкого барьера в результате долгих мук получаем

$$A_3 = \frac{2ik_1 k_2 e^{-ik_1 a}}{(k_1^2 + k_2^2) \sin(k_2 a) + 2ik_1 k_2 \cos(k_2 a)} A_1,$$

что позволяет вычислить коэффициент прохождения [\(22\)](#)²

$$D = \left(1 + \left(\frac{k_2^2 - k_1^2}{2k_1 k_2}\right)^2 \sin^2(k_2 a)\right)^{-1}.$$

Этот коэффициент осциллирует при изменении длины барьера, никогда не превосходит единицу, но может быть ей равен, если

$$k_2 a = \pi n, \quad n = 1, 2, \dots^3 \quad (26)$$

То, что происходит с частицей при прохождении над прямоугольным барьером полностью аналогично оптическому отражению от тонкой пленки. Отношение «показателей преломления» (см. (25))

$$\frac{n_2}{n_1} = \frac{k_2}{k_1} = \frac{\sqrt{(E-U_0)}}{\sqrt{E}}$$

показывает, что в точке $x = 0$ происходит отражение «от оптически менее плотной среды», а в точке $x = a$ – от «оптически более плотной», поэтому набег фазы (внутри «тонкой пленки», от 0 до a и обратно от a до 0) равен $2k_2 a + \pi$. При выполнении условия (26) это дает $2\pi n + \pi$, т.е. отраженные от двух скачков потенциала волны оказываются в противофазе, и прохождение становится полным.

Теперь обратимся к случаю высокого барьера, $E < U_0$, т.е. к случаю, когда в классической механике наш барьер, хоть и конечной длины, оказывается непреодолимым для частицы. Вычисления дают

$$A_3 = \frac{2ik_1 \kappa_2 e^{-ik_1 a}}{(k_1^2 - \kappa_2^2) \operatorname{sh}(\kappa_2 a) + 2ik_1 \kappa_2 \operatorname{ch}(\kappa_2 a)} A_1,$$

и

¹ Можно воспользоваться какой-либо математической системой. Коэффициент A_1 , конечно, как и раньше, считаем известным.

² Поскольку нас интересует волна, прошедшая за барьер, в область III, то в указанной формуле вместо A_2 используем A_3 , а на место k_2 ставим k_1 .

³ Если $n = 0$, а барьер таки есть, т.е. $a \neq 0$, то $k_2 = 0$. В этом случае надо раскрывать неопределенность (лучше всего, по формуле Тейлора), что дает $D = (1 + k_1^2 a^2 / 4)^{-1}$.

Коэффициент прохождения над барьером

$$D = \left(1 + \left(\frac{k_1^2 + k_2^2}{2k_1 k_2}\right)^2 \operatorname{sh}^2(k_2 a)\right)^{-1}.$$

Синусы и косинусы стали гиперболическими,¹ а зависимость коэффициента прохождения от длины барьера – монотонной, но самое главное и удивительное – частица может просочиться через барьер! Помните: частица заглядывает под барьер – и в этом случае видит свет в конце туннеля и изо всех сил старается пробраться туда. Силы быстро иссякают (ох уж эти экспоненты!), но за барьером опять есть волна, характеризующая вероятность того, что частица доползла до конца туннеля.

Прохождение частицы под потенциальным барьером называется туннельным эффектом. Этот эффект широко используется в современной электронике и микроэлектронике. Об этом вам расскажут в соответствующих курсах.

Коэффициент прохождения *под* барьером = вероятность преодолеть барьер

Туннельный эффект

¹ Кое-где гиперболический синус $\operatorname{sh}(x) = (e^x - e^{-x})/2$ называют «шинусом», а гиперболический косинус $\operatorname{ch}(x) = (e^x + e^{-x})/2$ – «чинусом».