Занятие 23
Тема: Уравнение Шредингера. Часть 1.
Цель: Волновая функция. Уравнение Шредингера. Потенциальный барьер. Туннельный эффект.

Краткая теория

• Состояние микрочастицы задает **волновая функция** ψ, в общем случае являющаяся комплексной величиной. Она конечна, однозначна и непрерывна вместе со своей первой производной. Физический смысл имеет произведение $\psi\psi^* = |\psi|^2$ описывающее **плотность вероятности** распределения частицы в пространстве («*» означает комплексное сопряжение, прямые скобки – знак модуля комплексной величины). **Вероятность** dP обнаружить частицу в области пространства dV: $dP = \psi\psi^* dV$. Поскольку частица заведомо существует в пространстве, то полная вероятность обнаружить ее соответствует достоверному событию, вероятность которого равна единице. Отсюда появляется **условие нормировки** волновой функции: $\int \psi\psi^* dV = 1$.

• **Стационарное уравнение Шредингера** позволяет рассчитать волновые функции частицы и соответствующие им энергии, не зависящие от времени. Оно имеет вид $\nabla^2\psi + \frac{2m(E-U)}{\hbar^2}\psi = 0$, где $\nabla = \vec{i}\frac{\partial}{\partial x} + \vec{j}\frac{\partial}{\partial y} + \vec{k}\frac{\partial}{\partial z}$ - дифференциальный векторный оператор «набла».

• **Туннельный эффект**. Обладая волновыми свойствами, частица может оказаться в области пространства, в которую, согласно классическим представлениям, ей не проникнуть. Наиболее наглядно эта ситуация выглядит в случае потенциального барьера на пути частицы, высота которого превышает кинетическую энергию частицы. Однако, с волновой точки зрения, как импульс частицы, так и ее энергия, точно не определены, ввиду такой неопределенности, она может преодолеть потенциальный барьер. Коэффициент прозрачности (пропускания), то есть вероятность прохождения, прямоугольного потенциального барьера шириной d и высотой U для частицы массой m: $D \cong \exp(-\frac{2d\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar})$, где U - E - превышение высоты барьера над энергией частицы.

Примеры решения задач

23-1. Частица с импульсом p_x движется вдоль оси x в свободном пространстве. Определить волновую функцию частицы.

• Операторное уравнение импульса $\tilde{P}\psi = \bar{p}\psi$ спроектируем на ось x и учтем вид оператора импульса $\tilde{P}_x = -i\hbar\nabla_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$. После проектирования:

$-i\hbar\frac{d\psi}{dx} = p_x\psi$, откуда $\psi = A\exp(\frac{ip_x}{\hbar}x) = A\exp(ikx)$, где $k = \frac{p_x}{\hbar}$ – волновое число, A - постоянная. Волновая функция является периодической, ее период по оси x (длину волны λ) можно найти из соотношения $k\lambda = \frac{p_x}{\hbar}\lambda = 2\pi$, откуда $\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p_x} = \frac{h}{p_x}$. Полученная длина волны есть ни что иное, как длина волны де Бройля. Сама волновая функция соответствует волне де Бройля, но без учета ее зависимости от времени, которая не влияет на распределение плотности вероятности и энергию в стационарных состояниях. Постоянная A имеет смысл амплитуды волны.

Ответ: $\psi = A\exp(ikx)$.

23-2. Частица массой m налетает на прямоугольный бесконечно длинный потенциальный барьер высотой U_0, расположенный вдоль оси x: при $x < 0$ $U = 0$, при $x \geq 0$ $U = U_0$. Энергия частицы $E > U_0$. Найти коэффициенты отражения и пропускания барьера для частицы.

• В каждой области: до барьера при $x < 0$ и в области барьера при $x \geq 0$ запишем уравнение Шредингера.

При $x < 0$: $\psi'' + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0$. Решение уравнения:

$\psi = a_1\exp(ik_1x) + b_1\exp(-ik_1x)$, где $k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} > 0$, a_1, b_1 – амплитуды падающей и отраженной волн. Это плоские волны типа волны де Бройля, рассмотренной выше . По аналогии с волной де

Бройля квадраты модулей амплитуд определяют вероятность реализации каждой из волн.

При $x \geq 0$ $\psi'' + \dfrac{2m(E-U_0)}{\hbar^2}\psi = 0$. Решение уравнения:

$\psi_2 = a_2 \exp(ik_2 x) + b_2 \exp(-ik_2 x)$, где $k_2 = \dfrac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar} > 0$, a_2 – амплитуда прошедшей волны, $b_2 = 0$ – амплитуда отраженной волны, так как в области барьера отраженной волны нет.

Волновая функция и ее первая производная должны быть непрерывны, это означает, что при $x = 0$ выполнено $\psi_1(0) = \psi_2(0)$ и $\psi_1'(0) = \psi_2'(0)$. Отсюда можно получить систему двух уравнений: $a_1 + b_1 = a_2$ и $k_1(a_1 - b_1) = k_2 a_2$.

В уравнения входят три неизвестных величины, однако для решения задачи достаточно знать только отношение b_1/a_1. Действительно, коэффициент отражения R дает квадрат модуля отношения амплитуд отраженной и падающей волн. Его можно найти из полученной системы: $\dfrac{b_1}{a_1} = \dfrac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}$ и $R = (\dfrac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2})^2$. Для вычисления коэффициента пропускания T частицы достаточно учесть, что коэффициенты отражения и пропускания в сумме дают единицу. Тогда коэффициент пропускания: $T = 1 - R = \dfrac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2}$.

Из полученных результатов следует, что, несмотря на частичное отражение, частица продолжает движение над барьером.

Ответ: $R = (\dfrac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2})^2$, $T = \dfrac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2}$.

23-3. Частица массой m налетает на прямоугольный бесконечно длинный потенциальный барьер высотой U_0, расположенный вдоль оси x: при $x < 0$ $U = 0$, при $x \geq 0$ $U = U_0$, причем энергия частицы $E < U_0$. Найти коэффициенты отражения и пропускания барьера.

• Как и в предыдущей задаче, отдельно рассмотрим две области: до барьера и в области барьера. В каждой области также запишем уравнение Шредингера.

При $x < 0$: $\psi'' + \dfrac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0$. Решение уравнения:

$\psi = a_1 \exp(ik_1 x) + b_1 \exp(-ik_1 x)$, где $k_1 = \dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar} > 0$.

При $x \geq 0$ $\psi'' + \dfrac{2m(E-U_0)}{\hbar^2}\psi = 0$. Решение уравнения:

$\psi_2 = a_2 \exp(-ik_2\, x) + b_2 \exp(ik_2\, x) = a_2 \exp(\kappa\, x) + b_2 \exp(-\kappa\, x)$, где

$k_2 = i\dfrac{\sqrt{2m(U_0-E)}}{\hbar} = i\kappa, \quad \kappa = \dfrac{\sqrt{2m(U_0-E)}}{\hbar} > 0$.

Во второй области экспоненты, входящие в волновую функцию ψ_2, имеют не мнимые, а действительные, показатели. Условие конечности волновой функции приводит к заключению, что $a_2 = 0$, иначе волновая функция будет испытывать бесконечный рост при увеличении x. Остающееся второе слагаемое в ψ_2 дает затухающую по амплитуде функцию.

Непрерывность волновой функции и ее первой производной при $x = 0$ приводит к системе двух уравнений: $a_1 + b_1 = b_2$ и $i\,k_1(a_1 - b_1) = -\kappa\, b_2$, из которой коэффициент отражения: $R = \left|\dfrac{b_1}{a_1}\right|^2 = \dfrac{|k_1 - i\kappa|^2}{|k_1 + i\kappa|^2} = 1$, так как модули комплексных чисел в числителе и знаменателе полученного выражения одинаковы. Очевидно, коэффициент пропускания $T = 0$.

Результат имеет простое объяснение. Хотя частица и проходит какое-то расстояние в области барьера, она выбрасывается назад создающими барьер силами.

Ответ: $R = 1$, $T = 0$.

23-4. Используя результат решения предыдущей задачи, найти коэффициент пропускания линейного потенциального барьера произвольной формы, имеющего конечную ширину d и расположенного вдоль оси x. Энергия частицы меньше высоты потенциального барьера.

• Разделим реально существующий потенциальный барьер на малые участки Δx_i прямоугольной формы и высоты U_i, на каждом из которых пренебрежем отражением частицы от правой стенки барьера. Согласно полученным выше результатам, вероятность ΔP_i того, что частица преодолеет рассматриваемый участок, составляет

$$\Delta P_i = \psi_2 \psi_2^* \Delta x_i = \left| b_{2i} \right|^2 \exp(-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U_i - E)}\Delta x_i) \cong \exp(-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U_i - E)}\Delta x_i)$$

.

Последнее равенство является приближенным, так как из решения предыдущей задачи можно найти $\left|\frac{b_2}{a_1}\right|^2 = \frac{4k_1^2}{k_1^2 + \kappa^2}$. Это отношение близко к единице для не слишком больших значений высоты потенциального барьера. Более точное рассмотрение может быть проведено при использовании условия нормировки волновой функции.

Исходя из допущения об отсутствии отражения частицы, можно считать, что прохождение частицей каждого прямоугольного барьера осуществляется независимым образом, тогда полная вероятность прохождения реального барьера будет произведением вероятностей прохождения всех промежуточных прямоугольных барьеров:

$$P = \Delta P_1 \cdot \Delta P_2 \cdot \Delta P_3 \cdots = \exp(-\frac{2}{\hbar}\sum_i \sqrt{2m(U_i - E)}\Delta x_i)_{\Delta x_i \to 0} =$$

$$= \exp(-\frac{2}{\hbar}\int_0^d \sqrt{2m(U(x) - E)}dx).$$

Переход к интегрированию означает выбор бесконечно малых участков Δx_i внутри потенциального барьера. С физической точки зрения вычисленная вероятность является коэффициентом пропускания *T*. При сложном виде потенциального барьера требование положительности подкоренной функции полученного выражения может привести к изменению как нижнего, так и верхнего, пределов интегрирования. А именно, интегрирование должно осуществляться на промежутке, задаваемом соотношением $U(x_{1,2}) = E$.

Ответ: $T = \exp(-\frac{2}{\hbar}\int_0^d \sqrt{2m(U(x) - E)}dx)$.

Задачи для самостоятельного решения

23-5. Частица с волновым числом *k* движется вдоль оси *x* на промежутке от –*l* до *l*. Найти волновую функцию и среднее значение кинетической энергии частицы.

Ответ: $\psi = \frac{1}{\sqrt{2l}} \exp(ikx)$, $\overline{E} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$.

23-6. Частица массой m налетает на прямоугольный бесконечно длинный потенциальный барьер высотой U_0, причем ее энергия $E < U_0$. Найти эффективную глубину проникновения частицы в область барьера и коэффициент отражения.

Ответ: $l \cong \hbar / \sqrt{2m(U_0 - E)}$, $R = 1$.

23-7. Электрон с энергией E налетает на прямоугольный потенциальный барьер высотой U и конечной шириной. Определить эту ширину, если вероятность прохождения электрона сквозь барьер составляет P.

Ответ: $d = -\frac{\hbar \ln(P)}{2\sqrt{2m(U - E)}}$.

23-8. Электрон с энергией E, двигаясь в положительном направлении оси x, преодолевает треугольный потенциальный барьер, расположенный на оси в промежутке от 0 до l. Зависимость потенциальной энергии от координаты имеет вид $U(x) = U_0 \frac{x}{l}$, причем $U_0 > E$. Найти коэффициент пропускания электрона барьером.

Ответ: $T = \exp(-\frac{4(U_0 - E)^{3/2}(2m)^{1/2}}{3\hbar U_0} l)$.

Контрольные задачи

23-9. Временная часть уравнения Шредингера имеет вид $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = E\psi$. Решить уравнение и найти временную зависимость волновой функции в стационарном состоянии частицы.

23-10. Частица с волновым числом k движется вдоль оси x на промежутке от $-l$ до l. Найти проекцию импульса частицы на ось.

23-11. Электрон, первоначально имевший длину волны λ_1, движется в области бесконечно длинного потенциального барьера высотой U_0. Определить длину волны электрона в области барьера.

23-12. Ширина прямоугольного потенциального барьера составляет d, его высота U_0. Энергия E налетающей частицы меньше высоты барьера на $\Delta\varepsilon$. Как изменится вероятность прохождения частицей барьера, если разность энергий увеличить в n раз?

23-13. Ширина прямоугольного потенциального барьера составляет d, его высота U_0. Энергия E налетающей частицы меньше высоты барьера на $\Delta\varepsilon$. Во сколько раз изменится вероятность прохождения сквозь барьер, если ширина барьера уменьшится в n раз?
23-14. Поток электронов энергии E направлен на низкий потенциальный барьер бесконечной ширины. Отражается η% электронов. Определить высоту барьера.
23-15. Электрон с энергией E, двигаясь в положительном направлении оси x, преодолевает симметричный треугольный потенциальный барьер, расположенный на оси в промежутке от -l до l. Зависимость потенциальной энергии от координаты имеет вид: при -l $\le x \le 0$ $U(x) = U_0 \dfrac{l+x}{l}$, при $0 \le x \le l$ $U(x) = U_0 \dfrac{x}{l}$, причем $U_0 > E$. Найти коэффициент пропускания электрона барьером.