

соотношения, связывающего  $\omega$  и  $k$ , потому что пространственная зависимость не выражается уже уравнением (2), и не существует определенного волнового числа  $k$ , соответствующего частоте  $\omega$ . Теперь для получения волновой функции  $f(z)$  нужно решить дифференциальное волновое уравнение Шредингера. Эта ситуация напоминает случай непрерывной струны, рассмотренной в п. 2.3. Там было показано, что моды струны имеют синусоидальную пространственную зависимость только в том случае, если среда (т. е. струна) однородна. Для неоднородной струны пространственная зависимость стоячих волн получается из решения дифференциального уравнения [уравнение (2.59) п. 2.3, мы полагаем натяжение  $T_0(z) = T_0 = \text{const}$  и плотность  $\rho_0(z)$  не постоянной]

$$\frac{d^2 f(z)}{dz^2} = -\frac{\omega^2 \rho_0(z)}{T_0} f(z). \quad (13)$$

Аналогично для неоднородного потенциала  $V(z)$  пространственная зависимость стоячих волн де Бройля получается из решения уравнения Шредингера, которое в этом случае имеет вид

$$\frac{d^2 f(z)}{dz^2} = \frac{2m}{\hbar^2} [V(z) - \hbar\omega] f(z). \quad (14)$$

### Д.3. Проникновение частицы в область пространства, «запрещенную» классической механикой

Сумма потенциальной и кинетической энергии классической (нерелятивистской) частицы равна

$$E = \frac{p^2}{2m} + V, \quad (1)$$

где  $p^2/2m$  — кинетическая энергия, а  $V$  — потенциальная энергия. Положим, что при  $0 \leq z \leq L$  потенциальная энергия  $V = V_1$ , а от  $z = L$  до  $+\infty$  и от  $z = 0$  до  $-\infty$   $V = V_2$  ( $V_2 > V_1$ ). Предположим, что классическая частица находится в такой потенциальной яме. Это возможно в том случае, если полная энергия частицы лежит между  $V_1$  и  $V_2$ . Тогда, если классическая частица находится в области между  $z = 0$  и  $z = L$ , она никогда «не выберется» из этой ямы. Она «носится» туда и обратно между стенками, имея импульс  $p_z = \pm \sqrt{2m(E - V_1)}$  и меняя его знак после соударения со стенкой. Частица не может проникнуть в область, где потенциальная энергия равна  $V_2$ , потому что тогда кинетическая энергия станет отрицательной:

$$\frac{p^2}{2m} = E - V = E - V_2 = -(V_2 - E) \quad \text{для } E < V_2. \quad (2)$$

Отрицательное значение кинетической энергии для классической частицы не имеет смысла.

Однако реальные частицы не являются классическими. Реальным частицам наряду со свойствами «твердых» частиц присущи свойства волн. Соотношения де Бройля  $p = \hbar k$  и Бора  $E = \hbar\omega$  определяют дисперсионное соотношение

$$\omega = \omega_0(z) + \frac{\hbar k^2}{2m} \quad \text{для } \omega > \omega_0, \quad (3)$$

где

$$\omega_0(z) \equiv \frac{V(z)}{\hbar}.$$

*Аналогия со связанными маятниками.* Соотношение (3) можно сравнить с дисперсионным соотношением для связанных маятников (в случае непрерывного приближения, см. п. 3.5)

$$\omega^2 = \omega_0^2(z) + \frac{K^2 a^2}{M} k^2 \quad \text{для } \omega^2 > \omega_0^2, \quad (4)$$

где

$$\omega_0^2(z) \equiv \frac{g}{l}. \quad (5)$$

Для связанных маятников, когда  $\omega$  меньше  $\omega_0$ , волны не синусоидальны. Они представляют собой экспоненциальные волны, а среда, в которой такие волны распространяются, называется реактивной. Дисперсионное соотношение принимает вид

$$\omega^2 = \omega_0^2 - \frac{K^2 a^2}{M} \kappa^2, \quad \omega^2 < \omega_0^2. \quad (6)$$

Здесь  $\delta = 1/\kappa$  — глубина проникновения. Аналогично для волн де Бройля, когда  $\omega$  меньше  $\omega_0$ , дисперсионное соотношение принимает вид

$$\omega = \omega_0(z) - \frac{\hbar \kappa^2}{2m}, \quad \omega < \omega_0. \quad (7)$$

Кинетическая энергия  $E - V_1$  для нашего случая будет равна

$$E - V_1 = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} \quad \text{для } 0 \leq z \leq L, \quad (8)$$

$$E - V_1 = -\frac{\hbar^2 \kappa_2^2}{2m} \quad \text{для других } z. \quad (9)$$

Таким образом, для частицы с положительной кинетической энергией соответствующие волны де Бройля синусоидальны (для однородной среды) и имеют волновое число  $k_1$ . Частице с отрицательной кинетической энергией соответствуют экспоненциальные волны де Бройля, характеризуемые коэффициентом ослабления  $\kappa_2$ . Волновые функции возможных состояний электрона, перемещения которого ограничены потенциальной ямой, очень похожи по форме на «граничные моды» системы связанных маятников, описанной в п. 3.5. Таким образом, волновая функция  $f(z)$ , соответствующая основному состоянию, синусоидальна в области положительной кинетической энергии (в дисперсивной области) с таким волновым числом, что  $kL$  немного меньше  $\pi$ . При  $z=0$  и  $z=L$  синусоидальная волновая функция без скачка (гладко) переходит в экспоненциальную функцию, которая уменьшается до нуля на бесконечном расстоянии от дисперсивной области. (Два самых низких стационарных состояния показаны на рис. Д.2.)

Из этого графика следует, что вероятность нахождения частицы в области координат, запрещенной классической механикой, не равна нулю. Для  $z$ , меньших нуля, вероятность пропорциональна  $|\exp[-\kappa_2(-z)]|^2$ , а для  $z$ , больших  $L$ , она пропорциональна  $|\exp[-\kappa_2(z-L)]|^2$ .

Заметим, что если  $V_2$  стремится к  $+\infty$ , то в соответствии с уравнением (9)  $\kappa_2$  становится равным бесконечности и глубина проникновения  $\delta$  стремится к нулю. Именно этот случай рассматривался в п. Д.2, где мы смогли сразу написать волновые числа разрешенных мод (состояний) и затем получить соответствующие энергии из дисперсионного соотношения. В настоящем примере конечной потенциальной ямы нахождение разрешенных значений  $k$  (внутри ямы) и  $\kappa$  (вне ямы) требует большой вычислительной работы.

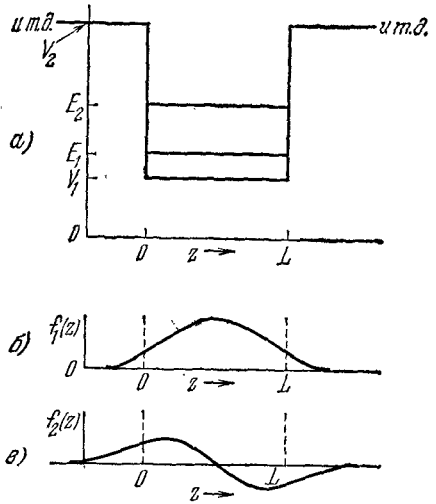


Рис. Д.2. Электрон в конечной потенциальной яме.

а) График  $V(z)$ . Горизонтальными линиями  $E_1$  и  $E_2$  показаны уровни энергии первой и второй моды (основное и первое возбужденное состояния). б) Волновая функция основного состояния  $f_1(z)$ . в) Волновая функция первого возбужденного состояния.