Приравняв ее $1/2\pi\hbar$, находим

$$A = \frac{(2m)^{1/3}}{\pi^{1/2}F^{1/6}\hbar^{2/3}}. \tag{24,8}$$

Задача

Определить волновые функции в импульсном представлении для частицы в однородном поле.

Решение. Гамильтониан в импульсном представлении

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2m} - i\hbar F\frac{d}{dp},$$

так что уравнение Шредингера для волновой функции $a(p)$ имеет вид

$$-i\hbar F\frac{da}{dp} + \left(\frac{p^2}{2m} - E\right)a = 0.$$

Решив это уравнение, получим искомые функции

$$a_E(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar F}}\exp\left\{\frac{i}{\hbar F}\left(Ep - \frac{p^3}{6m}\right)\right\}.$$

Эти функции нормированы условием

$$\int_{-\infty}^{+\infty} a_E^*(p)\, a_{E'}(p)\, dp = \delta(E' - E).$$

§ 25. Коэффициент прохождения

Рассмотрим движение частиц в поле изображенного на рис. 5 типа: $U(x)$ монотонно возрастает от одного постоянного предела ($U = 0$ при $x \to -\infty$) до другого ($U = U_0$ при $x \to +\infty$). Согласно классической механике частица с энергией $E < U_0$, движущаяся в таком поле слева направо, дойдя до *потенциальной стенки*, отражается от нее, начиная двигаться в обратном направлении; если же $E > U_0$, то частица продолжает двигаться в прежнем направлении с уменьшенной скоростью. В квантовой механике возникает новое явление — даже при $E > U_0$ частица может отразиться от потенциальной стенки. Вероятность отражения должна вычисляться в принципе следующим образом.

Пусть частица движется слева направо. При больших положительных значениях x волновая функция должна описывать частицу, прошедшую «над стенкой» и движущуюся в положительном направлении оси x, т. е. должна иметь асимптотический вид

$$\text{при } x \to \infty: \quad \psi \approx Ae^{ik_2x}, \quad k_2 = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E - U_0)} \tag{25,1}$$

(A — постоянная). Найдя решение уравнения Шредингера, удовлетворяющее этому предельному условию, вычисляем асимптотическое выражение при $x \to -\infty$; оно является линейной комбинацией двух решений уравнения свободного движения, т. е. имеет вид

$$\text{при } x \to -\infty: \quad \psi \approx e^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}, \quad k_1 = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}. \qquad (25,2)$$

Первый член соответствует падающей на стенку частице (предполагаем ψ нормированной таким образом, чтобы коэффициент при этом члене был равен единице); второй же член изображает отраженную от стенки частицу. Плотность потока в падающей волне пропорциональна k_1, в отраженной: $k_1|B|^2$, а в прошедшей: $k_2|A|^2$. Определим *коэффициент прохождения* D частицы как отношение плотности потока в прошедшей волне к плотности потока в падающей:

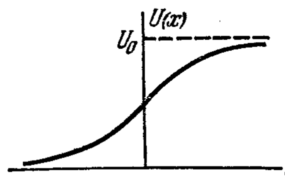

Рис. 5

$$D = \frac{k_2}{k_1}|A|^2. \qquad (25,3)$$

Аналогично можно определить *коэффициент отражения* R как отношение плотности отраженного потока к падающему; очевидно, что $R = 1 - D$:

$$R = |B|^2 = 1 - \frac{k_2}{k_1}|A|^2 \qquad (25,4)$$

(это соотношение между A и B выполняется автоматически в силу постоянства потока вдоль оси x).

Если частица движется слева направо с энергией $E < U_0$, то k_2 чисто мнимо и волновая функция экспоненциально затухает при $x \to +\infty$. Отраженный поток равен падающему, т. е. происходит полное отражение частицы от потенциальной стенки. Подчеркнем, однако, что и в этом случае вероятность нахождения частицы в области, где $E < U$, все же отлична от нуля, хотя и быстро затухает с увеличением x.

В общем случае произвольного стационарного состояния (с энергией $E > U_0$) асимптотический вид волновой функции как при $x \to -\infty$, так и при $x \to +\infty$ представляет собой сумму двух волн, распространяющихся в обе стороны оси x:

$$\begin{aligned} \psi &= A_1e^{ik_1x} + B_1e^{-ik_1x} \quad \text{при} \quad x \to -\infty, \\ \psi &= A_2e^{ik_2x} + B_2e^{-ik_2x} \quad \text{при} \quad x \to +\infty. \end{aligned} \qquad (25,5)$$

Поскольку оба эти выражения представляют собой асимптотические формы одного и того же решения линейного дифференциального уравнения, между коэффициентами A_1, B_1 и A_2, B_2 существует линейная связь. Пусть $A_2 = \alpha A_1 + \beta B_1$, где α, β — постоянные (вообще говоря, комплексные), зависящие от конкретного вида поля $U(x)$. Аналогичное соотношение для B_2 можно тогда написать на основании соображений, связанных с вещественностью уравнения Шредингера. В силу последней, если ψ есть решение данного уравнения Шредингера, то и комплексно сопряженная функция ψ^* есть решение того же уравнения. Асимптотический вид

$$\psi^* = A_1^* e^{-ik_1x} + B_1^* e^{ik_1x} \quad \text{при} \quad x \to -\infty,$$
$$\psi^* = A_2^* e^{-ik_2x} + B_2^* e^{ik_2x} \quad \text{при} \quad x \to +\infty$$

отличается от (25,5) лишь обозначением постоянных коэффициентов; поэтому имеем $B_2^* = \alpha B_1^* + \beta A_1^*$ или $B_2 = \alpha^* B_1 + \beta^* A_1$. Таким образом, коэффициенты в (25,5) связаны друг с другом соотношениями вида

$$A_2 = \alpha A_1 + \beta B_1, \quad B_2 = \beta^* A_1 + \alpha^* B_1. \tag{25,6}$$

Условие постоянства потока вдоль оси x приводит для коэффициентов в (25,5) к соотношению

$$k_1(|A_1|^2 - |B_1|^2) = k_2(|A_2|^2 - |B_2|^2).$$

Выразив здесь A_2, B_2 через A_1, B_1 согласно (25,6), получим

$$|\alpha|^2 - |\beta|^2 = \frac{k_1}{k_2}. \tag{25,7}$$

С помощью соотношений (25,6) можно показать, что коэффициенты отражения одинаковы (при заданной энергии $E > U_0$) для частиц, движущихся в положительном или отрицательном направлении оси x. Действительно, первый случай мы получим, положив в функциях (25,5) $B_2 = 0$; при этом $B_1/A_1 = -\beta^*/\alpha^*$. Во втором случае полагаем $A_1 = 0$, тогда $A_2/B_2 = \beta/\alpha^*$. Соответствующие коэффициенты отражения

$$R_1 = \left|\frac{B_1}{A_1}\right|^2 = \left|\frac{\beta^*}{\alpha^*}\right|^2, \quad R_2 = \left|\frac{A_2}{B_2}\right|^2 = \left|\frac{\beta}{\alpha^*}\right|^2,$$

откуда ясно, что $R_1 = R_2$.

Величины же $B_1/A_1 = -\beta^*/\alpha^*$ и $A_2/B_2 = \beta/\alpha^*$ естественно назвать *амплитудами отражения* соответственно для движения в положительном и отрицательном направлениях. Эти амплитуды равны по модулю, но могут отличаться фазовым множителем.

Задачи

1. Определить коэффициент отражения частицы от прямоугольной потенциальной стенки (рис. 6); энергия частицы $E > U_0$.

Решение. Во всей области $x > 0$ волновая функция имеет вид (25,1), а в области $x < 0$ — (25,2). Постоянные A и B определяются из условия непрерывности ψ и $d\psi/dx$ при $x = 0$:

$$1 + B = A, \quad k_1(1 - B) = k_2 A,$$

откуда

$$A = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}, \quad B = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}.$$

Коэффициент отражения (25,4) [1])

$$R = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2 = \left(\frac{p_1 - p_2}{p_1 + p_2}\right)^2.$$

При $E = U_0$ ($k_2 = 0$) R обращается в единицу, а при $E \to \infty$ стремится к нулю как $R = (U_0/4E)^2$.

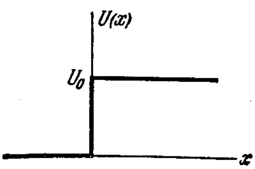

Рис. 6

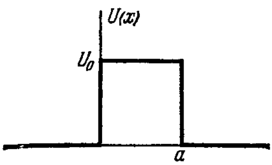

Рис. 7

2. Определить коэффициент прохождения частицы через прямоугольный потенциальный барьер (рис. 7).

Решение. Пусть $E > U_0$ и падающая частица движется слева направо. Тогда имеем для волновой функции в различных областях выражения вида

$$\text{при } x < 0; \qquad \psi = e^{ik_1x} + Ae^{-ik_1x},$$
$$\text{при } 0 < x < a: \qquad \psi = Be^{ik_2x} + B'e^{-ik_2x},$$
$$\text{при } x > a; \qquad \psi = Ce^{ik_1x}$$

(со стороны $x > a$ должна быть только прошедшая волна, распространяющаяся в положительном направлении оси x). Постоянные A, B, B', C определяются из условий непрерывности ψ и $d\psi/dx$ в точках $x = 0$, a. Коэффициент прохожде-

[1]) В предельном случае классической механики коэффициент отражения должен обратиться в нуль. Между тем полученное выражение вовсе не содержит квантовой постоянной. Это кажущееся противоречие разъясняется следующим образом. Классическому пределу соответствует случай, когда дебройлевская длина волны частицы $\lambda \sim \hbar/p$ мала по сравнению с характеристическими размерами задачи, т. е. по сравнению с расстояниями, на которых заметно меняется поле $U(x)$. В рассматриваемом же схематическом примере это расстояние равно нулю (в точке $x = 0$), так что предельный переход не может быть произведен.

ния определяется как $D = k_1 |C|^2/k_1 = |C|^2$. Вычисление приводит к результату:

$$D = \frac{4k_1^2k_2^2}{(k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2 ak_2 + 4k_1^2k_2^2}.$$

При $E < U_0$ k_2 — чисто мнимая величина; соответствующие выражения для D получаются заменой k_2 на $i\varkappa_2$, где $\hbar\varkappa_2 = \sqrt{2m(U_0 - E)}$:

$$D = \frac{4k_1^2\varkappa_2^2}{(k_1^2 + \varkappa_2^2)^2 \operatorname{sh}^2 a\varkappa_2 + 4k_1^2\varkappa_2^2}.$$

3. Определить коэффициент отражения частицы от потенциальной стенки, определяемой формулой

$$U(x) = U_0/(1 + e^{-\alpha x})$$

(см. рис. 5); энергия частицы $E > U_0$.

Решение. Уравнение Шредингера гласит:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{U_0}{1 + e^{-\alpha x}}\right)\psi = 0.$$

Мы должны найти решение, которое при $x \to +\infty$ имеет вид

$$\psi = \mathrm{const}\cdot e^{ik_2x}.$$

Вводим новую переменную

$$\xi = -e^{-\alpha x}$$

(пробегающую значения от $-\infty$ до 0) и ищем решение в виде:

$$\psi = \xi^{-ik_2/\alpha} w(\xi),$$

где $w(\xi)$ стремится к постоянной при $\xi \to 0$ (т. е. при $x \to \infty$). Для $w(\xi)$ получаем уравнение гипергеометрического типа

$$\xi(1 - \xi)w'' + \left(1 - \frac{2i}{\alpha}k_2\right)(1 - \xi)w' + \frac{1}{\alpha^2}(k_2^2 - k_1^2)w = 0,$$

имеющее решением гипергеометрическую функцию

$$w = F\left[\frac{i}{\alpha}(k_1 - k_2), \quad -\frac{i}{\alpha}(k_1 + k_2), \quad -\frac{2i}{\alpha}k_2 + 1, \ \xi\right]$$

(постоянный множитель не пишем). При $\xi \to 0$ эта функция стремится к 1, т. е. удовлетворяет поставленному условию.

Асимптотический вид функции ψ при $\xi \to -\infty$ (т. е. $x \to -\infty$) есть [1])

$$\psi \approx \xi^{-ik_2/\alpha}\left[C_1(-\xi)^{i(k_2-k_1)/\alpha} + C_2(-\xi)^{i(k_1+k_2)/\alpha}\right] =$$
$$= (-1)^{-ik_2/\alpha}\left[C_1e^{ik_1x} + C_2e^{-ik_1x}\right],$$

[1]) См. формулу (е,6), в каждом из двух слагаемых которой надо брать лишь первый член разложения, т. е. заменить гипергеометрические функции от $1/z$ единицей.

где

$$C_1 = \frac{\Gamma\left(-\frac{2i}{\alpha}k_1\right)\Gamma\left(-\frac{2i}{\alpha}k_2+1\right)}{\Gamma\left(-\frac{i}{\alpha}(k_1+k_2)\right)\Gamma\left(-\frac{i}{\alpha}(k_1+k_2)+1\right)},$$

$$C_2 = \frac{\Gamma\left(\frac{2i}{\alpha}k_1\right)\Gamma\left(-\frac{2i}{\alpha}k_2+1\right)}{\Gamma\left(\frac{i}{\alpha}(k_1-k_2)\right)\Gamma\left(\frac{i}{\alpha}(k_1-k_2)+1\right)}.$$

Искомый коэффициент отражения есть $R = |C_2/C_1|^2$; вычисление с помощью известной формулы

$$\Gamma(x)\,\Gamma(1-x) = \frac{\pi}{\sin \pi x}$$

приводит к результату:

$$R = \left(\frac{\operatorname{sh}\frac{\pi}{\alpha}(k_1-k_2)}{\operatorname{sh}\frac{\pi}{\alpha}(k_1+k_2)}\right)^2.$$

При $E = U_0$ ($k_2 = 0$) R обращается в единицу, а при $E \to \infty$ стремится к нулю по формуле

$$R = \left(\frac{\pi U_0}{\alpha\hbar}\right)^2 \frac{2m}{E}\, e^{-\frac{4\pi}{\alpha\hbar}\sqrt{2mE}}.$$

При предельном переходе к классической механике R обращается, как и следовало, в нуль.

4. Определить коэффициент прохождения частицы через потенциальный барьер, определяемый формулой

$$U(x) = \frac{U_0}{\operatorname{ch}^2 \alpha x}$$

(рис. 8); энергия частицы $E < U_0$.

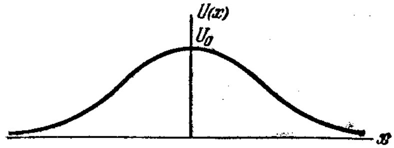

Рис. 8

Решение. Уравнение Шредингера для этой задачи получается из рассмотренного в задаче 5 § 23 примера изменением знака U_0, причем энергию E считаем теперь положительной.

Тем же способом получаем решение

$$\psi = (1-\xi^2)^{-\frac{ik}{2\alpha}} F\left(-\frac{ik}{\alpha}-s,\ -\frac{ik}{\alpha}+s+1,\ -\frac{ik}{\alpha}+1,\ \frac{1-\xi}{2}\right), \quad (1)$$

где

$$\xi = \operatorname{th} \alpha x,$$

$$k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE},$$

$$s = \frac{1}{2}\left(-1+\sqrt{1-\frac{8mU_0}{\alpha^2\hbar^2}}\right).$$

Это решение уже удовлетворяет условию, чтобы при $x \to \infty$ (т. е. при $\xi \to 1$, $(1-\xi) \approx 2e^{-2x}$) волновая функция содержала только прошедшую волну $(\sim e^{ikx})$. Асимптотический вид волновой функции при $x \to -\infty$ ($\xi \to -1$) находится путем преобразования гипергеометрической функции с помощью формулы (e, 7)

$$\psi \sim e^{-ikx} \frac{\Gamma(ik/\alpha)\,\Gamma(1-ik/\alpha)}{\Gamma(-s)\,\Gamma(1+s)} + e^{ikx} \frac{\Gamma(-ik/\alpha)\,\Gamma(1-ik/\alpha)}{\Gamma(-ik/\alpha - s)\,\Gamma(-ik/\alpha + s + 1)}. \quad (2)$$

Вычислив квадрат модуля отношения коэффициентов в этой функции, получим следующее выражение для коэффициента прохождения $D = 1 - R$:

$$D = \frac{\operatorname{sh}^2 \dfrac{\pi k}{\alpha}}{\operatorname{sh}^2 \dfrac{\pi k}{\alpha} + \cos^2\left(\dfrac{\pi}{2}\sqrt{1 - \dfrac{8mU_0}{\hbar^2\alpha^2}}\right)} \quad \text{при} \quad \frac{8mU_0}{\hbar^2\alpha^2} < 1,$$

$$D = \frac{\operatorname{sh}^2 \dfrac{\pi k}{\alpha}}{\operatorname{sh}^2 \dfrac{\pi k}{\alpha} + \operatorname{ch}^2\left(\dfrac{\pi}{2}\sqrt{\dfrac{8mU_0}{\hbar^2\alpha^2} - 1}\right)} \quad \text{при} \quad \frac{8mU_0}{\hbar^2\alpha^2} > 1.$$

Первая из этих формул относится также и к случаю $U_0 < 0$, т. е. когда частица проходит не над потенциальным барьером, а над потенциальной ямой. Интересно, что при этом $D = 1$, если $1 + (8m|U_0|/\hbar^2\alpha^2) = (2n+1)^2$, т. е. при определенных значениях глубины ямы $|U_0|$ проходящие над ней частицы не отражаются. Это видно уже из выражения (2), в котором при целом положительном s член с e^{-ikx} вообще отсутствует.

5. Определить закон обращения в нуль коэффициента прохождения при $E \to 0$, считая, что потенциальная энергия $U(x)$ быстро убывает на расстояниях $|x| \gg a$, где a — характерный размер области взаимодействия.

Решение. В области расстояний $k|x| \ll 1$ можно пренебречь энергией E в уравнении Шредингера. Если при этом $|x| \gg a$, то можно пренебречь и потенциальной энергией, и уравнение сводится к

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = 0,$$

решение которого мы запишем как

$$\psi = a_1 + b_1 x, \quad x < 0 \quad \text{и} \quad \psi = a_2 + b_2 x, \quad x > 0. \quad (1)$$

Решая уравнение на расстояниях $|x| \sim a$, можно найти связь между a_1, b_1 и a_2, b_2. Эта связь линейна и имеет вид

$$a_1 = \rho a_2 + \mu b_2; \quad b_1 = \nu a_2 + \tau b_2. \quad (2)$$

Коэффициенты ρ, μ, ν, τ вещественны и не зависят от энергии, так как энергия уже не входит в уравнение[1]). Решение (1) должно совпадать с первыми двумя членами разложения функций (25,1—2) по степеням x, откуда

$$a_1 = 1 + B, \quad b_1 = ik(1 - B), \quad a_2 = A, \quad b_2 = ikA.$$

Подставляя эти выражения в (2) и решая уравнения относительно A, находим при малых k: $A \approx 2ik/\nu$, откуда

$$D \approx \frac{4k^2}{\nu^2} \sim E.$$

Таким образом коэффициент прохождения обращается в нуль пропорционально энергии частицы. В примерах, рассмотренных в задачах 2 и 4, это общее соотношение, разумеется, выполняется.

[1]) В силу постоянства потока они удовлетворяют соотношению $\rho\tau - \mu\nu = 1$.