

от нуля до $n - n_1$. Суммируя полученное выражение по всем возможным значениям числа n_1 , найдем полное число комбинаций из трех квантовых чисел n_1, n_2, n_3 , дающих в сумме заданное число n , т. е. кратность вырождения n -го уровня энергии:

$$\sum_{n_1=0}^n (n - n_1 + 1) = \frac{1}{2} (n + 1) (n + 2). \quad (11,8)$$

§ 12. Отражение и прохождение через потенциальный барьер

Из других сравнительно простых задач квантовой механики остановимся на движении частиц в поле сил, которое может быть представлено в виде потенциального барьера. Это означает, что силы действуют на частицу в некоторой ограниченной области пространства. Вне этой области частица движется как свободная. Мы увидим, что изучение движения частиц в поле, имеющем вид барьера простейшей формы, позволит выявить ряд важных и принципиально новых свойств квантовых частиц. Начнем наше рассмотрение с простейшего прямоугольного бес-

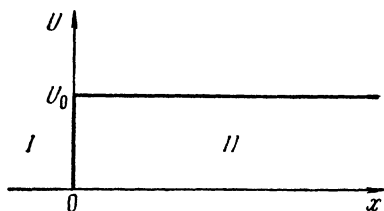


Рис. 6.

конечно протяженного одномерного потенциального барьера, изображенного на рис. 6. В классической механике всякая частица,двигающаяся слева направо с энергией, меньшей высоты барьера U_0 , полностью отражается от потенциальной стенки. Область $x > 0$ является для нее недоступной, так как в этой области полная энергия частицы была бы меньше потенциальной. Это означало бы, что кинетическая энергия должна была бы быть отрицательной, что, очевидно, невозможно. Если же, напротив, E больше U_0 , то по законам классической механики частица беспрепятственно проходит над барьером, двигаясь в области $x > 0$ с меньшей кинетической энергией, равной $E - U_0$.

Рассмотрим теперь движение частицы в тех же условиях по законам квантовой механики. Для этого напишем уравнение Шредингера для стационарных состояний частицы в поле бесконечно протяженного барьера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + U(x)\psi = E\psi, \quad (12,1)$$

где U — потенциальная энергия, график которой изображен на рис. 6. Решения уравнения (12, 1) удобно рассмотреть в двух

различных областях. Область I простирается от $x = -\infty$ до $x = 0$, область II — от $x = 0$ до $x = \infty$.

Напишем уравнение Шредингера для каждой из указанных областей:

$$\left. \begin{aligned} \frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi &= 0, & x < 0, \\ \frac{d^2\psi}{dx^2} + k'^2\psi &= 0, & x > 0, \end{aligned} \right\} \quad (12,2)$$

где введены обозначения

$$\left. \begin{aligned} k^2 &= \frac{2mE}{\hbar^2}, \\ k'^2 &= \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0). \end{aligned} \right\} \quad (12,3)$$

Решения этих уравнений соответственно запишутся в виде

$$\left. \begin{aligned} \psi(x) &= A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}, & x < 0, \\ \psi(x) &= A_2 e^{ik'x} + B_2 e^{-ik'x}, & x > 0. \end{aligned} \right\} \quad (12,4)$$

В этих формулах члены вида e^{ikx} представляют плоскую волну, распространяющуюся в положительном направлении оси x , а e^{-ikx} — плоскую волну, распространяющуюся в обратном направлении. Амплитуды A_1 , B_1 , A_2 и B_2 являются постоянными интегрирования. Зададим поток частиц, падающих на барьер. Пусть j_0 — плотность потока падающих частиц. Тогда, согласно (7, 6),

$$j_0 = \frac{\hbar k}{m} |A_1|^2.$$

Выберем для простоты поток таким, чтобы можно было положить $A_1 = 1$.

Для определения остальных постоянных рассмотрим поведение волновой функции на границе областей I и II в точке $x = 0$. В силу общих условий, накладываемых на волновую функцию и ее производную (см. § 6), они должны оставаться непрерывными даже в точке разрыва потенциальной энергии. Поэтому при $x = 0$ должны иметь место равенства

$$\psi(+0) = \psi(-0), \quad (12,5)$$

$$\psi'(+0) = \psi'(-0). \quad (12,6)$$

Из соотношений (12, 5) и (12, 6) можно определить еще две постоянные интегрирования A_2 и B_1 . Что касается постоянной B_2 , то мы должны положить $B_2 = 0$. Действительно, мы задаем поток частиц, распространяющихся в положительном направлении оси x . При $E > U_0$ (т. е. при вещественном k') слагаемое

в волновой функции, пропорциональное $e^{-ik'x}$, представляет плоскую волну, распространяющуюся в обратном направлении. В области *I* в отрицательном направлении оси x распространяется отраженная волна. В области *II* отраженной волны, очевидно, нет и, следовательно, нет волны, распространяющейся справа налево. Поэтому мы должны приравнять нулю амплитуду B_2 этой волны. Если же $E < U_0$ (k' — чисто мнимая величина), то функция $e^{-ik'x}$ экспоненциально возрастает при $x \rightarrow -\infty$, что противоречит условию конечности волновой функции. В силу этого коэффициент B_2 должен быть равен нулю и при мнимом значении k' , т. е. при $E < U_0$.

Рассмотрим более детально случай, когда полная энергия частицы больше высоты потенциального барьера $E > U_0$.

Из соотношений (12, 5) и (12, 6), учитывая (12, 4), имеем

$$\begin{aligned} 1 + B_1 &= A_2, \\ k(1 - B_1) &= k'A_2. \end{aligned}$$

Из этих уравнений находим амплитуды A_2 и B_1 :

$$B_1 = \frac{k - k'}{k + k'}, \quad A_2 = \frac{2k}{k + k'}. \quad (12,7)$$

Мы видим, что B_1 — амплитуда отраженной волны, отлична от нуля, хотя $E > U_0$. Это обстоятельство обусловлено волновыми свойствами частиц. Волна частично отражается, частично проходит в область *II*. Отношение плотности потока отраженных частиц j_r к плотности потока падающих j_0 назовем коэффициентом отражения R . Соответственно, отношение плотности потока проходящих частиц j_D к плотности потока падающих назовем коэффициентом прохождения D .

Учитывая (12,4), находим

$$j_r = \frac{\hbar k}{m} |B_1|^2, \quad j_D = \frac{\hbar k'}{m} |A_2|^2.$$

Так как $j_0 = \frac{\hbar k}{m}$, получаем

$$\left. \begin{aligned} R &= \left(\frac{k - k'}{k + k'} \right)^2, \\ D &= \frac{4kk'}{(k + k')^2}. \end{aligned} \right\} \quad (12,8)$$

Мы видим, что автоматически выполняется соотношение

$$R + D = 1, \quad (12,9)$$

выражающее закон сохранения числа частиц.

Отметим, что выражения (12,8) оказываются симметричными по отношению к k и k' , т. е. для частиц заданной

энергии E коэффициент отражения (а также и прохождения) оказывается не зависящим от направления движения частиц. Частицы, движущиеся слева направо, т. е. против действия силы в точке $x = 0$, имеют такую же вероятность отразиться в этой точке, что и частицы той же энергии, двигающиеся справа налево, по направлению действия силы в точке $x = 0$. Это обстоятельство также обусловлено волновым характером процесса и имеет соответствующую оптическую аналогию.

Рассмотрим теперь случай $E < U_0$. При этом k' — чисто мнимая величина, которую удобно записать в виде $k' = i\kappa$, где

$$\kappa = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}. \quad (12,10)$$

Амплитуда отраженной волны B_1 оказывается комплексной величиной, а коэффициент отражения R равен

$$R = |B_1|^2 = \left| \frac{k - i\kappa}{k + i\kappa} \right|^2 = 1, \quad D = 1 - R = 0. \quad (12,11)$$

Отраженная волна запишется в виде

$$\psi_r = \frac{k - i\kappa}{k + i\kappa} e^{-ikx} = e^{-i(kx + \delta)}, \quad (12,12)$$

т. е. отражение приводит к сдвигу фазы волны.

Из (12, 12) следует, что этот сдвиг равен

$$\delta = \arctg \frac{2k\kappa}{k^2 - \kappa^2}. \quad (12,13)$$

Хотя отражение и является полным, тем не менее волновая функция в области II отлична от нуля и имеет вид

$$\psi(x) = A_2 e^{-\kappa x} = \frac{2k}{k + i\kappa} e^{-\kappa x} \quad (x > 0). \quad (12,14)$$

Соответственно плотность вероятности того, что частица находится в точке x в области $x > 0$, равна

$$|\psi(x)|^2 = \frac{4k^2}{k^2 + \kappa^2} e^{-2\kappa x}. \quad (12,15)$$

Мы видим, что поведение квантовых частиц существенно отличается от классических. Для частицы, двигающейся по законам классической механики, область $x > 0$ при $E < U_0$ являлась запретной. Напротив, частица, движущаяся по законам квантовой механики, с известной вероятностью может проникнуть в эту область. Проникновение частиц в область запрещенных энергий представляет специфически квантовый эффект, получивший название туннельного эффекта. Эффективная глубина проникновения в область II, т. е. расстояние δx от границы области II, на котором вероятность нахождения частицы еще за-

метно отлична от нуля, как видно из формулы, имеет порядок величины $\delta x \sim \frac{1}{\kappa}$. При $x \gg \delta x$ плотность вероятности (12, 15) оказывается экспоненциально малой.

Оценим эффективную глубину проникновения для электрона, считая, что $U_0 - E \sim 1 \text{ эв} = 1,6 \cdot 10^{-12} \text{ эрг}$. Для δx имеем, очевидно,

$$\delta x \sim \frac{\hbar}{\sqrt{2m(U_0 - E)}} \sim \frac{10^{-27}}{\sqrt{2 \cdot 10^{-27} \cdot 1,6 \cdot 10^{-12}}} \sim 10^{-8} \text{ см.}$$

Оценка показывает, что весь эффект может быть замечен только в области микроскопических размеров. Таким образом, как этого и следовало ожидать, туннельный эффект не может проявляться при движении макроскопических тел, для которых справедливы законы классической механики.

Чтобы фактически обнаружить частицу в области II, мы должны локализовать ее там в некотором малом интервале $\Delta x \leq \delta x$. При этом, локализуя частицу, мы заведомо меняем ее состояние (ее энергию), так как в силу соотношения неопределенностей $\Delta p \geq \frac{\hbar}{\Delta x} \geq \hbar \kappa$. Частица, которую мы обнаружим где-то в области II, уже не будет обладать первоначальной энергией E .

С неопределенностью в импульсе связана неопределенность в кинетической энергии частицы:

$$\Delta T \geq \frac{\Delta p^2}{2m} \geq \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m}.$$

Подставляя сюда выражение для κ (12,10), мы получаем:

$$\Delta T \geq U_0 - E.$$

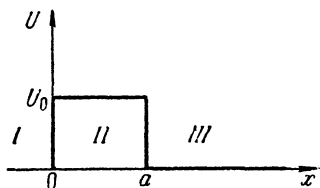


Рис. 7.

Таким образом, неопределенность энергии частицы, локализованной в области под барьером, больше той энергии, которой ей не хватает до высоты барьера.

Рассмотрим кратко барьер конечной протяженности, изображенный на рис. 7. Частицы падают на барьер, двигаясь в положительном направлении оси x . Используя результаты и обозначения предыдущего рассуждения, мы сразу можем выписать волновую функцию в трех различных областях:

$$\psi(x) = e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}, \quad x < 0, \quad U = 0, \quad I \quad (12,16)$$

$$\psi(x) = A_2 e^{ik'x} + B_2 e^{-ik'x}, \quad 0 \leq x \leq a, \quad U = U_0, \quad II \quad (12,17)$$

$$\psi(x) = A_3 e^{ikx}, \quad x > a, \quad U = 0. \quad III \quad (12,18)$$

При этом (как и в случае бесконечно протяженного барьера) мы опять положили амплитуду падающей волны, равной единице. Поскольку в области III нет отраженной волны, в качестве решения взята только волна, распространяющаяся в положительном направлении оси x . Выпишем условия непрерывности волновой функции и ее первой производной на границах областей, аналогичные (12, 5) и (12, 6):

$$\left. \begin{aligned} \psi(+0) &= \psi(-0), & \psi'(+0) &= \psi'(-0), \\ \psi(a+0) &= \psi(a-0), & \psi'(a+0) &= \psi'(a-0). \end{aligned} \right\} \quad (12,19)$$

Подставляя в эти соотношения (12, 16) — (12, 18), получаем систему уравнений относительно B_1, A_2, B_2 и A_3 :

$$\left. \begin{aligned} 1 + B_1 &= A_2 + B_2, & A_2 e^{ik'a} + B_2 e^{-ik'a} &= A_3 e^{ika}, \\ k(1 - B_1) &= k'(A_2 - B_2), & A_2 e^{ik'a} - B_2 e^{-ik'a} &= \frac{k}{k'} A_3 e^{ika}. \end{aligned} \right\} \quad (12,20)$$

Рассмотрим сразу наиболее интересный случай $E < U_0$. Если бы движение частиц происходило по законам классической механики, то барьер был бы для них полностью непрозрачным и в точке $x = 0$ частицы испытывали бы полное отражение от потенциального барьера. Иначе дело обстоит в случае микрочастиц, движение которых описывается законами квантовой механики.

Разрешая систему (12, 20) относительно A_3 и учитывая, что $k' = i\kappa$, где κ определена в (12, 10), получаем

$$A_3 = \frac{4ik\kappa e^{-ika}}{(k + i\kappa)^2 e^{\kappa a} - (k - i\kappa)^2 e^{-\kappa a}}. \quad (12,21)$$

Амплитуда плоской волны оказывается отличной от нуля в области за барьером, хотя энергия частицы меньше высоты барьера $E < U_0$. Это означает, что микрочастица с известной вероятностью может пройти через потенциальный барьер путем туннельного перехода. Туннельное прохождение частиц, первоначально казавшееся парадоксальным эффектом, в настоящее время не только обнаружено на опыте, но играет фундаментальную роль в ряде областей физики, в частности, в ядерной физике. Достаточно сказать, что с туннельным прохождением через барьер связаны α -распад радиоактивных ядер, явление самопроизвольного деления ядер урана и т. п. Туннельным переходом обусловлено явление холодной эмиссии электронов из металлов в сильном электрическом поле и ряд других процессов.

Определим коэффициент прохождения D микрочастиц через барьер:

$$D = \frac{j_D}{j_0} = |A_3|^2 = \frac{4k^2\kappa^2}{(k^2 + \kappa^2)^2 \operatorname{sh}^2 \kappa a + 4k^2\kappa^2}. \quad (12,22)$$

Если $\kappa a \gg 1$, то $\operatorname{sh} \kappa a \approx \frac{1}{2} e^{\kappa a}$, и выражение (12,22) упрощается:

$$D \simeq \frac{16k^2\kappa^2}{(k^2 + \kappa^2)^2} e^{-2\kappa a}. \quad (12,23)$$

Основная зависимость коэффициента прохождения от ширины и высоты барьера определяется экспоненциальным множителем. Обозначая предэкспоненциальный множитель через D_0 , имеем

$$D = D_0 e^{-\frac{2}{\hbar} a \sqrt{2m(U_0 - E)}}. \quad (12,24)$$

Мы видим, что вероятность прохождения через барьер не слишком мала, если

$$\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} a \leq 1. \quad (12,25)$$

Условие (12,25) может, очевидно, выполняться только в области микроявлений. Так, если мы подставим в (12,25) величины ядерных масштабов $a \sim 10^{-13}$ см, $m \sim 10^{-24}$ г (масса нуклона), $U_0 - E \sim 10$ Мэв (10^{-5} эрг), то, произведя оценку, находим, что $D \sim e^{-1}$. Таким образом, частица может с заметной вероятностью пройти через барьер, высота которого превышает ее энергию на 5—10 Мэв. Совершенно иной результат получится для той же частицы и той же высоты барьера, если его пространственная протяженность будет составлять $a \sim 1$ см. Тогда $D \sim 10^{-13}$. Это означает, что в области макроскопических явлений эффект туннельного перехода практически полностью отсутствует. Вероятность туннельного прохождения через барьеры произвольной формы мы рассмотрим в § 42.

§ 13. Одномерное движение ¹⁾

В этой главе был рассмотрен ряд простых задач квантовой механики, относящихся к одномерному движению. Рассмотренные трехмерные задачи также сводятся к одномерным, потому что уравнение Шредингера с потенциалом

$$U(x, y, z) = U_1(x) + U_2(y) + U_3(z)$$

сводится к одномерным уравнениям с потенциалами U_1 , U_2 и U_3 соответственно. Полученные результаты позволяют сделать некоторые общие выводы о свойствах одномерного движения частиц.

¹⁾ См. подробнее Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, Квантовая механика, Физматгиз, 1963, стр. 83.