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

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

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

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

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

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

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.

При одномерном движении уровни энергии могут принадлежать как к дискретному (см. § 8—11), так и к сплошному спектру (§ 12). Состояниям дискретного спектра, как мы видели, отвечают квадратично интегрируемые волновые функции, т. е. волновые функции, для которых условие нормировки может быть написано в виде

$$\int |\psi_n(x)|^2\,dx = 1.$$

Это условие означает, что движение финитно, т. е. вероятность обнаружить частицу на сколь угодно больших расстояниях исчезающе мала.

Наоборот, если частица может уходить на сколь угодно большие расстояния, т. е. движение инфинитно, ее волновая функция квадратично не интегрируема. Можно показать, что в этом случае энергия принадлежит сплошному спектру. Предположим, что потенциальная энергия частицы $U(x)$ как-то меняется от ее значения при $x \to \infty$, $U(\infty)$, которое мы выберем за начало отсчета энергии, до значения $U(-\infty) = U_0$ при $x \to \infty$. Будем считать, для определенности, U_0 положительным, $U_0 > 0$. Функция $U(x)$ может меняться совершенно произвольно. Предположим лишь, что она имеет минимум $U_{\min} < 0$. Тогда при энергии $U_{\min} < E < 0$ частица не может уйти на бесконечность. При этих значениях энергии движение финитно, а спектр дискретен. Уровни энергии дискретного спектра не вырождены. Последнее утверждение легко доказывается от противного. Действительно, если предположить, что ψ_1 и ψ_2 — два решения уравнения Шредингера, отвечающее одному и тому же значению энергии E, то они удовлетворяют соотношению

$$\frac{1}{\psi_1}\frac{d^2\psi_1}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}(U - E) = \frac{1}{\psi_2}\frac{d^2\psi_2}{dx^2},$$

т. е.

$$\frac{1}{\psi_1}\frac{d^2\psi_1}{dx^2} = \frac{1}{\psi_2}\frac{d^2\psi_2}{dx^2}.$$

Интегрируя это соотношение по x, получаем

$$\psi_2\frac{d\psi_1}{dx} - \psi_1\frac{d\psi_2}{dx} = \text{const}. \qquad (13,1)$$

Но на бесконечности $\psi_1 = \psi_2 = 0$. Поэтому постоянная в правой части соотношения (13,1) равна нулю, следовательно,

$$\psi_2\frac{d\psi_1}{dx} = \psi_1\frac{d\psi_2}{dx}.$$

Интегрируя еще раз по x, получаем $\psi_2 = \text{const}\cdot\psi_1$. Это означает, что обе функции описывают одно и то же состояние, т. е. вырождение отсутствует.

В области

$$0 < E < U_0$$

частица может распространяться в сторону положительных x как угодно далеко. Поэтому движение инфинитно, а энергетический спектр — сплошной. Волновые функции при этом также не вырождены. Действительно, предыдущее доказательство справедливо и в этом случае, так как волновые функции обращаются в нуль при $x \to -\infty$. Асимптотические выражения для волновых функций при $x \to \pm\infty$ легко получить из уравнения Шредингера

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U(x))\psi = 0,$$

если подставить туда $U = 0$ при $x \to \infty$ и $U = U_0$ при $x \to -\infty$. Соответственно получаем

$$\psi(x) = A \sin(kx + \alpha) \quad \text{при} \quad x \to \infty, \tag{13,2}$$

и

$$\psi(x) = Be^{\varkappa x} \quad \text{при} \quad x \to -\infty, \tag{13,3}$$

где

$$k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE} \quad \text{и} \quad \varkappa = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - E)}.$$

т. е. решение имеет вид стоячей плоской волны при $x \to \infty$ и экспоненциально затухает при $x \to -\infty$.

В энергетической области

$$E > U_0$$

движение инфинитно в обе стороны. Энергетический спектр — сплошной. Так как уравнение Шредингера — второго порядка, оно имеет два линейно независимых решения. В этой области энергий оба эти решения удовлетворяют необходимым требованиям. Поэтому уровни энергии — двукратно вырождены. Асимптотическое выражение для волновой функции имеет вид

$$\psi = A_1 e^{ikx} + A_2 e^{-ikx}, \tag{13,4}$$

где одно слагаемое соответствует частице, движущейся в положительном направлении оси x, а второе — частице, движущейся в отрицательном направлении оси x.

Предположим теперь, что поле неограниченно возрастает, т. е. $|U(x)| \to \infty$ при $x \to \pm\infty$. В качестве простейшего и в то же время важного примера рассмотрим задачу о движении частицы в однородном внешнем поле

$$U(x) = -f \cdot x.$$

Ось x мы выбрали в направлении поля. Через f обозначена сила, действующая на частицу $f = -\frac{dU}{dx}$. Потенциальную энергию мы отсчитываем от ее значения при $x = 0$, поэтому $U(0) = 0$. Уравнение Шредингера для движения в таком поле имеет вид

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E + fx)\psi = 0. \tag{13,5}$$

Введем вместо x новую переменную:

$$\eta = \left(\frac{2mf}{\hbar^2}\right)^{1/3}\left(x + \frac{E}{f}\right).$$

Соответственно уравнение (13,5) будет иметь вид

$$\frac{d^2\psi}{d\eta^2} + \eta\psi = 0. \tag{13,6}$$

Решение уравнения (13,6) может быть выражено через функцию Бесселя

$$\psi(\eta) = \sqrt{\eta}\, Z_{1/3}\left(\frac{2}{3}\eta^{3/2}\right).$$

Более удобным является выражение решения (13,6) через так называемую функцию Эйри. Именно, решение уравнения (13,6), конечное при всех значениях η, имеет вид

$$\psi(\eta) = C\Phi(\eta), \tag{13,7}$$

где через $\Phi(\eta)$ обозначена функция Эйри

$$\Phi(\eta) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_0^\infty \cos\left(\frac{u^3}{3} + u\eta\right) du, \tag{13,8}$$

а C — нормировочная постоянная.

Таким образом, уравнение Шредингера (13,5) имеет решение, удовлетворяющее необходимым требованиям при любом значении энергии E. Следовательно, при движении в однородном поле энергетический спектр частицы является сплошным, что соответствует инфинитному движению. В данном случае $U \to -\infty$ при $x \to \infty$, т. е. неограниченным является движение в положительном направлении оси x.

Волновая функция (13,7) имеет достаточно простой вид при $\eta \to \pm\infty$. Пользуясь известными асимптотическими выражениями для функции Эйри (см. сноску, стр. 59), имеем

$$\psi(\eta) = \frac{C}{2|\eta|^{1/4}} e^{-\frac{2}{3}|\eta|^{3/2}} \quad \text{при} \quad \eta \to -\infty, \tag{13,9}$$

и

$$\psi(\eta) = \frac{C}{\eta^{1/4}} \sin\left(\frac{2}{3}\eta^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right) \quad \text{при} \quad \eta \to \infty. \tag{13,10}$$

Постоянная C определяется из условия нормировки. Интеграл от квадрата модуля волновой функции (13,7) по всему пространству, конечно, расходится, что соответствует инфинитному движению. Правила нормировки в подобных случаях мы обсудим в § 18.

§ 14. Уравнение Шредингера для системы частиц

В предыдущих параграфах мы рассмотрели законы движения одной частицы во внешнем поле. Однако круг рассмотренных задач был весьма ограничен. В самом деле, уже простейшая система — атом водорода — представляет собой, строго говоря, систему из двух частиц. Тем более это относится к таким системам, как многоэлектронные атомы, молекулы, ядра атомов, твердое тело и т. д. Обобщая результаты, полученные в § 6, сформулируем основное уравнение квантовой механики — уравнение Шредингера для системы N частиц. Оно имеет вид:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\sum_{i=1}^{N}\left(-\frac{\hbar^2}{2m_i}\right)\Delta_i\psi+\sum_{i=1}^{N}U_i(\boldsymbol{r}_i)\psi+U_{\text{вз}}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\ldots,\boldsymbol{r}_N)\psi. \quad (14,1)$$

Здесь лапласиан Δ_i

$$\Delta_i=\frac{\partial^2}{\partial x_i^2}+\frac{\partial^2}{\partial y_i^2}+\frac{\partial^2}{\partial z_i^2}$$

действует на координаты i-й частицы. $U_i(\boldsymbol{r}_i)$ — потенциальная энергия i-й частицы во внешнем поле. $U_{\text{вз}}$ — потенциальная энергия взаимодействия частиц между собой, m_i — масса i-й частицы. Суммирование проводится по всем частицам системы. Волновая функция, описывающая систему частиц, в соответствии с § 2 зависит от координат всех частиц и времени $\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\ldots,\boldsymbol{r}_N,t)$.

Уравнение Шредингера для стационарных состояний имеет вид

$$\sum_{i=1}^{N}\left(-\frac{\hbar^2}{2m_i}\right)\Delta_i\psi+\sum_{i=1}^{N}U_i(\boldsymbol{r}_i)\psi+U_{\text{вз}}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\ldots,\boldsymbol{r}_N)\psi=E\psi. \quad (14,2)$$

В качестве простейшего примера интегрирования уравнения (14,2) рассмотрим систему невзаимодействующих друг с другом частиц, т. е. будем предполагать, что энергия взаимодействия равна нулю $U_{\text{вз}}=0$. В этом случае уравнение Шредингера можно переписать в виде

$$\sum_{i=1}^{N}\left(-\frac{\hbar^2}{2m_i}\Delta_i+U_i(\boldsymbol{r}_i)\right)\psi=E\psi, \quad (14,3)$$