

Если такое решение существует, то всякое другое решение, получаемое умножением на постоянный коэффициент, будет обладать аналогичными свойствами, поэтому мы не будем различать решения, отличающиеся на постоянный множитель. Если допустимы два линейно независимых решения, то всякая их линейная комбинация также будет допустимым решением. В этом случае говорят, что собственное значение имеет *вырождение кратности или порядка 2*; по определению кратность или порядок вырождения есть число линейно независимых собственных функций, принадлежащих данному собственному значению.

Уравнение (5) вещественно ( $V(x)$  есть вещественная функция  $x$ ). Если  $\psi$  есть собственная функция, то ее действительная и мнимая части также являются собственными функциями (в случае отсутствия вырождения они отличаются только на постоянный множитель). Поэтому для нахождения всех собственных функций, соответствующих данному собственному значению, достаточно знать все действительные собственные функции. Это замечание существенно упрощает вычисления.

В первом разделе мы рассмотрим точно решаемую задачу на собственные значения в случае некоторых прямоугольных потенциалов. Особенное внимание будет обращено на различия между квантовыми и классическими движениями, а именно на квантование уровней энергии связанных состояний и явления отражения волн, резонанса и прохождения потенциальных барьеров несвязанными «частицами». Во втором разделе мы подвергнем систематическому изучению уравнение (5) для произвольного потенциала  $U(x)$ . Это позволит нам распространить на общий случай некоторые результаты, полученные в первом разделе.

## Раздел I. ПРЯМОУГОЛЬНЫЕ ПОТЕНЦИАЛЫ

### § 2. Общие свойства

Для проявления типично квантовых эффектов необходимо, чтобы потенциал  $U(x)$  заметно изменялся на расстояниях порядка длины волны. Наиболее простым типом потенциала, отвечающего этому требованию, является прямоугольный потенциал: это потенциал, обладающий разрывами непрерывности первого рода (т. е. резкими скачками конечной величины) в некоторых точках, а между этими точками постоянный. Ось  $x$  таким образом подразделяется на некоторое число интервалов, в каждом из которых потенциал имеет вполне определенное постоянное значение.

Наличие разрывов первого рода у потенциала  $U(x)$  не изменяет условия регулярности, которым должна удовлетворять

функция  $\psi$ . Действительно, согласно уравнению Шредингера,

$$\psi'' = (U - \epsilon)\psi.$$

Следовательно, в точках скачков потенциала функция  $\psi''$  также разрывна, но первообразная  $\psi'$ , а также  $\psi$  остаются всюду непрерывными функциями.

Пусть теперь  $U_i$  есть значение (постоянное) потенциала  $U(x)$  в  $i$ -ом интервале ( $i = 1, 2, \dots, n$ ). Общее решение в этой области есть линейная комбинация экспоненциальных функций. Но поведение решения существенно зависит от знака  $\epsilon - U_i$ .

Если  $\epsilon > U_i$ , то мы имеем комбинацию экспонент с мнимыми показателями:  $e^{ik_i x}$  и  $e^{-ik_i x}$  ( $k_i = \sqrt{\epsilon - U_i}$ ), т. е. фактически комбинацию синуса и косинуса; поведение решения имеет «осцилляторный» характер.

Если же  $\epsilon < U_i$ , то имеет место комбинация действительных экспонент  $e^{\kappa_i x}$  и  $e^{-\kappa_i x}$  ( $\kappa_i = \sqrt{U_i - \epsilon}$ ). В этом случае мы говорим, что решение имеет «экспоненциальный» характер поведения.

Чтобы написать общее решение дифференциального уравнения, сначала выражают его в виде линейной комбинации экспонент (действительных или мнимых) в каждом из  $n$  интервалов. Параметры этих комбинаций (число их равно  $2n$ ) находятся из условий непрерывности функции и ее производной в точках разрыва непрерывности потенциала. Это дает  $2(n-1)$  условий, поскольку имеется  $n-1$  точка разрыва. Общее решение таким образом, оказывается зависящим от двух произвольных параметров, что и следовало ожидать. Чтобы получаемое решение было собственной функцией необходимо, чтобы оно было ограничено на всей оси, т. е. оказывалось ограниченным в каждом из пределов  $x \rightarrow +\infty$  и  $x \rightarrow -\infty$ . Заметим, что если энергия  $\epsilon$  меньше значения потенциала во всем интервале  $(-\infty, +\infty)$ , то общее решение всюду имеет экспоненциальный характер. Вторая производная  $\psi''$  всюду имеет тот же знак, что и сама функция  $\psi$ . Отсюда нетрудно вывести, что общее решение экспоненциально растет при  $x \rightarrow -\infty$  или  $x \rightarrow +\infty$  или же в обоих случаях. Задача на собственные значения при этом не имеет решения. Отметим, что и в классической механике движение возможно только, если энергия превосходит значение потенциала хотя бы в некоторой части интервала  $(-\infty, +\infty)$ .

Если  $\epsilon$  превосходит хотя бы одну из величин  $U_i$ , то существование и число собственных функций зависят от характера поведения (осцилляторного или экспоненциального) общего решения в двух бесконечно удаленных концах оси  $x$ .

### § 3. Скачок потенциала. Отражение и прохождение волн

Простейшим примером прямоугольного потенциала является резкий скачок потенциала ( $n = 2$ ), представленный на рис. 8.

$$U(x) = \begin{cases} U_1, & \text{если } x > 0 \text{ (область I),} \\ U_2, & \text{если } x < 0 \text{ (область II).} \end{cases}$$

Будем считать для определенности, что  $U_2 > U_1$ .

Возможны два случая:

а)  $U_2 > \varepsilon > U_1$ . Общее решение имеет осцилляторный характер в области I ( $x > 0$ ) и экспоненциальный характер в области II ( $x < 0$ ). Чтобы это решение могло явиться приемлемой собственной функцией необходимо, чтобы в области II оно было экспоненциально затухающим. Всегда существует одно и только одно решение, удовлетворяющее этому условию. Каждое значение  $\varepsilon$  в указанном интервале является невырожденным собственным значением: спектр энергии *непрерывный невырожденный*. Общее решение имеет вид:

$$y = \begin{cases} A_1 \sin(k_1 x + \varphi) & x > 0, \\ A_2 e^{\kappa_2 x} & x < 0. \end{cases} \quad (6)$$

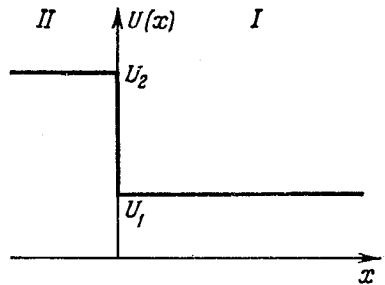


Рис. 8. Скачок потенциала.

Условия непрерывности определяют  $y$  с точностью до постоянной. Вместо того, чтобы рассматривать непрерывность функции и ее производной, удобнее потребовать непрерывности функции и ее *логарифмической производной*  $y'/y$ . Непрерывность логарифмической производной определяет фазу

$$k_1 \operatorname{ctg} \varphi = \kappa_2;$$

$\varphi$  определяется с точностью до слагаемого  $\pi$ , так как замена  $\varphi$  на  $\varphi + \pi$  эквивалентна замене знака амплитуды  $A_1$ . Примем для  $\varphi$  значение

$$\varphi = \operatorname{arctg} \frac{k_1}{\kappa_2}, \quad (6a)$$

причем  $\operatorname{arctg}$  выражает значения этой функции в интервале  $(-\pi/2, +\pi/2)$ .

Непрерывность функции определяет отношение  $A_2/A_1$ , именно

$$\frac{A_2}{A_1} = \sin \varphi = \frac{k_1}{\sqrt{k_1^2 + \kappa_2^2}} = \sqrt{\frac{\varepsilon - U_1}{U_2 - U_1}}. \quad (6b)$$

б)  $\varepsilon > U_2$ . Общее решение имеет осцилляторный характер во всем пространстве и является поэтому допустимой собственной функцией. Каждому значению  $\varepsilon$  соответствуют две линейно независимые собственные функции; спектр собственных значений *непрерывный двукратно вырожденный*.

Образует собственную функцию, поведение которой в области II имеет вид  $e^{-ik_2x}$ . Она определяется с точностью до постоянной, которую мы выберем так, чтобы коэффициент при члене  $e^{-ik_1x}$  в области I был равен единице. Иначе говоря

$$\chi = \begin{cases} e^{-ik_1x} + Re^{ik_1x} & x > 0, \\ Se^{-ik_2x} & x < 0. \end{cases} \quad (7)$$

Постоянные (вообще говоря, комплексные)  $R$  и  $S$  определяются условиями непрерывности в точке  $x = 0$ . Непрерывность логарифмической производной дает

$$R = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}, \quad (7a)$$

а непрерывность самой функции —

$$S = 1 + R = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}. \quad (7b)$$

Комплексно сопряженная функция  $\chi^*$  есть собственная функция, линейно независимая с  $\chi$ . Все собственные функции, соответствующие собственному значению  $\varepsilon$ , могут быть записаны как линейные комбинации  $\chi$  и  $\chi^*$ .

Сравним полученные результаты с теми, которые дает классическая механика. Движение классической частицы в рассматриваемом потенциале различно в случаях а) и б).

В случае а) классическое движение соответствует движению частицы с энергией  $(\hbar^2/2m)\varepsilon$ . Частица, приходя из  $+\infty$ , пробегает положительную половину с постоянной скоростью  $\hbar k_1/m$  в направлении уменьшения  $x$ , затем упруго отражается от точки  $x = 0$  и уходит обратно с той же скоростью в бесконечность. Чтобы описать аналогичное движение в волновой механике, следует построить волновой пакет из волн типа  $y e^{-iE|t/\hbar}$  с близкими энергиями. Вместо функции (6) удобнее использовать волну

$$\psi_\varepsilon(x) = \begin{cases} e^{-ik_1x} - e^{i(k_1x+2\varphi)} & x > 0, \\ \frac{2A_2}{iA_1} e^{i\varphi} e^{ik_2x} & x < 0, \end{cases} \quad (8)$$

получаемую, если  $y$  разделить на  $\frac{1}{2} iA_1 e^{-i\varphi}$ ; мы пишем индекс  $\varepsilon$ , чтобы указать, что это собственная функция, соответствующая

собственному значению  $\epsilon$ . Рассмотрим волновой пакет

$$\Psi(x, t) = \int_0^{\infty} f(k'_1 - k_1) \psi_{\epsilon'}(x) e^{-iE't/\hbar} dk'_1. \quad (9)$$

Функция  $f(k'_1 - k_1)$  есть достаточно регулярная действительная функция  $k'_1$ , обладающая резким максимумом при  $k'_1 = k_1$  (штрих у  $k'_1$  здесь не имеет отношения к производной по  $x$ ; смысл величин  $k'_1$ ,  $\epsilon'$ ,  $E'$  и их взаимные связи очевидны). Дабы устранить ненужные сложности, примем, кроме того, что  $f(k'_1 - k_1)$  обращается в нуль при  $k_1'^2 > U_2 - U_1$ . Таким образом, функция  $\Psi(x, t)$  образована суперпозицией собственных функций случая а) с характерным множителем  $e^{-iE't/\hbar}$ , учитывающим зависимость от времени. По самому построению  $\Psi$  является решением уравнения Шредингера, зависящего от времени. Нетрудно представить себе, как эта функция меняется во времени, если обратиться к исследованию свободных волновых пакетов (гл. II).

В области I решение  $\Psi(x, t)$  есть суперпозиция двух величин: «падающего волнового пакета»

$$\Psi_l(x, t) = \int_0^{\infty} f(k'_1 - k_1) e^{-ik'_1 x} e^{-iE't/\hbar} dk'_1, \quad (10a)$$

центр которого  $-(1/\hbar)(dE/dk_1)t = -v_1 t$  перемещается со скоростью  $v_1 = \hbar k_1/m$  в отрицательном направлении и достигает точки  $x = 0$  в момент  $t = 0$ , и «отраженного волнового пакета»

$$\Psi_r(x, t) = - \int_0^{\infty} f(k'_1 - k_1) e^{i(k'_1 x + 2\varphi')} e^{-iE't/\hbar} dk'_1, \quad (10b)$$

центр которого  $x = v_1 t - 2d\varphi/dk_1$  перемещается со скоростью  $v_1$  в противоположном направлении и покидает начало координат в момент

$$\tau = \frac{2}{v_1} \frac{d\varphi}{dk_1} = 2\hbar \frac{d\varphi}{dE}, \quad (11)$$

который отличается от момента  $t = 0$  прихода «падающего волнового пакета» в точку  $x = 0$ . Движение центра волнового пакета, таким образом, почти идентично движению классической частицы. Единственное отличие состоит в запаздывании  $\tau$ , которое обнаруживает центр пакета при отражении от точки разрыва непрерывности потенциала  $x = 0$ , тогда как отражение классической частицы происходит мгновенно. Заметим по этому поводу, что само рассмотрение движения центра пакета имеет

смысл только, если форма пакета не слишком меняется за время движения. Это условие выполняется в случае падающего волнового пакета, пока его центр отстоит от начала координат на расстоянии, большем, чем ширина пакета  $\Delta x$ . Чтобы то же условие выполнялось для отраженного волнового пакета необходимо, кроме того, чтобы ширина  $\Delta k$  максимума функции  $f$  была достаточно малой. При этом фаза  $\varphi$  не меняется заметно в области, дающей наибольший вклад в интеграл (9), если  $\Delta k (d\varphi/dk_1) \ll 1$ . Поскольку пространственные размеры  $\Delta x$  пакета порядка  $1/\Delta k$ , это условие можно записать в виде

$$\Delta x \gg \frac{d\varphi}{dk_1}. \quad (12)$$

Следовательно,  $\Delta x/v_1 \gg \tau$ . Пакет волн настолько широк, что время, за которое он пересекает весь некоторую точку на оси, значительно больше запаздывания, вызванного отражением.

Помимо запаздывания  $\tau$  имеется еще одно отличие между движением классической частицы и отражением квантового волнового пакета. Волна  $\Psi$  не всегда равна нулю в области II. Исследование, аналогичное вышеприведенному, показывает, что  $\Psi$  равна произведению фактора  $2A_2 e^{i\varphi} / A_1$  на величину, принимающую заметные значения в промежуток времени, близкий моменту  $t = \tau/2$ ; этот промежуток можно рассматривать как время столкновения с потенциальной «стенкой» в точке  $x = 0$ . Таким образом, в этот момент времени существует отличная от нуля вероятность найти частицу в области II, в то время как классическая частица никогда не проникает в эту область.

Рассмотрим теперь случай б). В этом случае имеются два возможных классических движения, соответствующих одному значению энергии<sup>1)</sup>. В одном частица пробегает всю ось от  $+\infty$  до  $-\infty$ , причем ее скорость, постоянная и равная  $v_1 = \hbar k_1/m$  в области I, меняется скачком от  $v_1$  до  $v_2 = \hbar k_2/m$  в точке разрыва непрерывности потенциала; в дальнейшем частица движется со скоростью  $v_2$  до  $-\infty$ . Другое возможное движение есть в точности противоположное движение частицы, пробегающей ось  $x$  в положительном направлении со скоростью  $v_2$  в области II и скоростью  $v_1$  в области I.

Сравним эти классические движения с движениями волновых пакетов, находящихся в тех же начальных условиях. Сделаем это для первого из движений (перемещение в отрицательном направлении). Действуя соответственно случаю а), образуем волновой пакет, аналогичный формуле (9), как суперпозицию собственных функций, соответствующих собственным

<sup>1)</sup> Этот факт следует сравнить с наличием двукратного вырождения в соответствующей квантовой задаче.

значениям, близким  $\epsilon$ . Снабдим собственную функцию  $\chi$  типа (7) индексом  $\epsilon$ , чтобы отметить, что она зависит от энергии. *A priori* пакет должен включать суперпозицию функций  $\chi_\epsilon$  и  $\chi_\epsilon^*$ . Но чтобы осуществить желаемые начальные условия, пакет должен содержать только функции  $\chi_\epsilon$ , что будет видно из дальнейшего. Запишем поэтому

$$\Psi(x, t) = \int_0^\infty f(k'_1 - k_1) \chi_\epsilon(x) e^{-iE't/\hbar} dk'_1.$$

Единственное отличие от формулы (9) состоит в том, что максимум  $k_1 = \sqrt{e - U_1}$  функции  $f$  находится в области энергий б), а не в области а). Эволюция волнового пакета во времени исследуется аналогично формуле (9) и дает следующие результаты.

Мы констатируем, что начальные условия удовлетворяются, а именно при  $t \ll 0$  функция  $\Psi(x, t)$  практически равна нулю в области II, а в области I заметный вклад дает только член  $e^{-ik_1 x}$ , т. е. мы получаем волновой пакет, центр которого  $x = -v_1 t$  перемещается как классическая частица со скоростью  $v_1$  в направлении уменьшения  $x$  и достигает начала в момент  $t = 0$ . В дальнейшем  $\Psi(x, t)$  разделяется на два пакета: «проходящий волновой пакет»

$$\Psi_t(x, t) = \int_0^\infty f(k'_1 - k_1) S' e^{-ik'_2 x} e^{-iE't/\hbar} dk'_1,$$

центр которого  $x = -v_2 t$  строго следует движению классической частицы, и «отраженный волновой пакет»

$$\Psi_r(x, t) = \int_0^\infty f(k'_1 - k_1) R' e^{ik'_1 x} e^{-iE't/\hbar} dk'_1,$$

центр которого  $x = v_1 t$  движется так, как классическая частица, претерпевшая упругое отражение в точке  $x = 0$ . Существует, таким образом, очень важное отличие от классического движения: *квантовая «частица» имеет отличную от нуля вероятность «отразиться» при прохождении точки разрыва потенциала.* Чтобы продолжить этот анализ, следует уточнить эту вероятность, что будет сделано в гл. IV. Отметим здесь без доказательства, что вероятность найти частицу в отраженной волне равна  $|R|^2$ , а вероятность найти ее в прошедшей волне равна  $(k_2/k_1) |S|^2$  (см. задачу IV.2). Эти результаты согласованы, так как сумма этих двух величин равна единице

$$|R|^2 + \frac{k_2}{k_1} |S|^2 = 1, \quad (13)$$

что легко проверить, подставляя в это уравнение выражения (7а) и (7б).

Величина

$$T = \frac{k_2}{k_1} |S|^2 = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2} \quad (14)$$

называется *коэффициентом прохождения*. Эта величина растет с энергией и стремится к 1, когда  $\varepsilon \rightarrow \infty$ . Можно сказать, что в этом пределе мы получаем результат классической механики.

Можно заметить, что  $T$  есть симметричная функция  $k_1$  и  $k_2$ . Следовательно, волна той же энергии, но распространяющаяся в противоположном направлении (от области II к области I), имеет одинаковый коэффициент прохождения: он не зависит от направления движения.

Все эти результаты не могут очень удивить, если принять во внимание аналогию с распространением световой волны. Рассматриваемая выше задача вполне эквивалентна задаче о распространении светового сигнала в непоглощающей среде с переменным показателем преломления. В случае а) показатель переходит от действительного значения (среда I) к значению мнимому (среда II) в точке  $x = 0$ : имеет место полное отражение. В случае б) показатель остается действительным, но значения его в средах I и II различны: резкое изменение показателя сопровождается частичным отражением.

#### § 4. Бесконечно высокий потенциальный барьер

Предельным случаем предшествующей задачи является задача о частице, встречающей бесконечно высокий потенциальный барьер. Предположим для определенности, что  $U(x) = +\infty$ , когда  $x < 0$ . Мы находимся в ситуации, аналогичной случаю а), когда  $U_2 \rightarrow +\infty$ . Из формул (6), (6а), (6б) в этом предельном случае ( $\kappa_2 \rightarrow \infty$ ) следует, что волна обращается в нуль в точке  $x = 0$ .

Это общий результат, не зависящий от формы функции  $U(x)$  в области  $x > 0$ . Действительно, волновая функция в области  $x < 0$  по необходимости принимает форму  $Ae^{\kappa_2 x}$ , ее логарифмическая производная есть  $\kappa_2$ . В пределе, когда потенциал  $V_2$  стремится к бесконечности,  $\kappa_2$  также становится бесконечным. Значит функция должна иметь бесконечную логарифмическую производную в точке  $x = 0$ , т. е., иными словами, обратиться в нуль.

Таким образом, в предельном случае бесконечно высокого потенциального барьера волновая функция должна обращаться в нуль на границе этого барьера.



## § 5. Бесконечно глубокая потенциальная яма. Дискретный спектр

В качестве второго простого примера мы рассмотрим случай бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной ямы. Значение потенциала на дне ямы будем считать началом отсчета значений энергии. Эта область нулевого потенциала занимает некоторый участок оси  $(-L/2, +L/2)$ ; с обеих сторон интервал ограничен бесконечно высокими потенциальными барьерами (рис. 9).

Задача о собственных значениях сводится к нахождению функции  $\psi$ , обращающейся в нуль в точках  $+L/2$  и  $-L/2$  и удовлетворяющей в интервале  $(-L/2, +L/2)$  уравнению Шредингера

$$\psi'' + \varepsilon\psi = 0.$$

Общее решение есть линейная комбинация  $\sin kx$  и  $\cos kx$  ( $k = \sqrt{\varepsilon}$ ). Решения, одновременно удовлетворяющие двум граничным условиям, существуют только при некоторых дискретных значениях  $\varepsilon$ , а именно:

$$\varepsilon_n = \frac{n^2\pi^2}{L^2} \quad (n = 1, 2, \dots, \infty) \quad (15)$$

(решения, для которых  $kL = n\pi$ ). Каждому из этих значений  $\varepsilon_n$  соответствует одна и только одна собственная функция (вырождения нет), а именно:

$$\psi_n = \cos \frac{n\pi}{L} x \quad \text{при } n \text{ нечетном,} \quad (16a)$$

$$\psi_n = \sin \frac{n\pi}{L} x \quad \text{при } n \text{ четном.} \quad (16b)$$

Этот простой результат вызывает целый ряд общих замечаний. Во-первых, данный результат принципиально отличается от результата классической механики. В том же потенциале классическая частица может двигаться при любой положительной энергии. Это будет периодическое движение туда и обратно между двумя потенциальными стенками, находящимися на концах интервала  $(-L/2, +L/2)$ . В квантовой механике движение

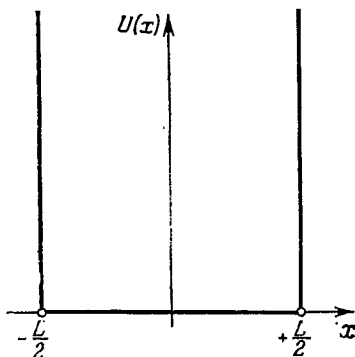


Рис. 9. Бесконечно глубокая прямоугольная потенциальная яма.

может иметь место только при некоторых определенных дискретных значениях энергии<sup>2)</sup>: *энергия частицы квантуется*.

Второе замечание касается *четности* собственных функций<sup>3)</sup>. Функции четные, если  $n$  нечетно (уравнение (16а)), и нечетные, если  $n$  четно (уравнение (16б)). То обстоятельство, что собственные функции обладают определенной четностью, связано со свойствами потенциала, который является четной функцией относительно начала координат:

$$U(x) = U(-x).$$

Проблема четности во всей полноте будет рассмотрена в § 14.

Последнее замечание относится к *числу узлов* собственных функций. По определению узлы суть точки, в которых функция обращается в нуль (за исключением нулей на концах интервала  $-L/2 + L/2$ ). Число узлов монотонно растет с ростом собственного значения энергии, оно увеличивается на единицу при переходе от некоторого собственного значения к ближайшему последующему: собственная функция основного состояния  $\psi_1$  не имеет узлов, ..., собственная функция  $n$  — 1-го возбужденного состояния  $\psi_n$  имеет  $n - 1$  узел и т. д. Полезно подчеркнуть аналогию с числом узлов стационарных состояний закрепленной на концах колеблющейся струны. Сходство здесь полное, так как математически обе задачи тождественны.

## § 6. Конечная потенциальная яма. Резонансы

Результаты, полученные нами на примерах скачка потенциала и бесконечно глубокой потенциальной ямы, помогут нам рассмотреть более сложные случаи. В качестве нового примера возьмем потенциал, изображенный на рис. 10. Здесь функция  $U(x)$  принимает вид:

$$U(x) = \begin{cases} U_1 & x > a & (\text{область I}), \\ U_2 & a > x > b & (\text{область II}), \\ U_3 & b > x & (\text{область III}), \end{cases}$$

причем  $U_2 < U_1 < U_3$ .

Задача о собственных значениях представляется различной в зависимости от величины  $\varepsilon$  по сравнению с постоянными  $U_1$ ,  $U_2$  и  $U_3$ .

а)  $U_2 < \varepsilon < U_1$ . *Дискретный спектр и связанные состояния*.

<sup>2)</sup> Период классического движения равен  $h/\Delta E$ , где  $\Delta E$  — расстояние между ближайшими уровнями, в согласии с принципом соответствия.

<sup>3)</sup> Функция  $f(x)$  есть четная функция, если  $f(x) = f(-x)$ , и нечетная, если  $f(x) = -f(-x)$ .

Общее решение ведет себя экспоненциально во внешних областях I и III, а во внутренней области характер его поведения осцилляторный. Чтобы быть приемлемым в качестве собственной функции, решение должно экспоненциально затухать в обеих внешних областях. Существует одно и только одно решение, экспоненциально затухающее в области I, а также одно и только одно решение, затухающее в области III; эти два решения согласованно сшиваются только при некоторых определенных дискретных значениях  $\epsilon$ . Мы делаем заключение, что энергетический спектр по необходимости дискретен и не вырожден.

Функция  $\psi$ , по предположению вещественная (ср. стр. 85), в каждой из трех областей имеет вид:

$$\varphi = \begin{cases} A_1 e^{-\kappa_1 x} & x > a, \\ A_2 \sin(k_2 x + \varphi) & a > x > b, \\ A_3 e^{\kappa_3 x} & b > x. \end{cases} \quad (17)$$

Если фаза  $\varphi$  известна, то два условия непрерывности функции определяют постоянные  $A_1, A_2, A_3$  (с точностью до постоянного множителя).

Что же касается  $\varphi$ , то она должна удовлетворять одновременно двум условиям непрерывности логарифмических производных:

$$k_2 \operatorname{ctg}(k_2 a + \varphi) = -\kappa_1, \quad k_2 \operatorname{ctg}(k_2 b + \varphi) = \kappa_3; \quad (18)$$

иными словами

$$\varphi = -k_2 a - \operatorname{arctg} \frac{k_2}{\kappa_1} + n\pi \quad (n - \text{целое положительное}), \quad (19)$$

$$\varphi = -k_2 b + \operatorname{arctg} \frac{k_2}{\kappa_3}$$

( $\varphi$  определяется с точностью до слагаемого  $n\pi$ ; мы требуем, чтобы  $k_2 b + \varphi$  находилось в интервале  $(-\pi/2; +\pi/2)$ ). Это возможно в том и только в том случае, когда правые части двух последних уравнений равны. Указанное равенство может быть реализовано только при некоторых дискретных значениях  $\epsilon_n$  величины  $\epsilon$ , а именно при тех значениях, которые удовлетворяют уравнению

$$n\pi - k_2(a - b) = \operatorname{arctg} \frac{k_2}{\kappa_1} + \operatorname{arctg} \frac{k_2}{\kappa_3}. \quad (20)$$

Введем следующие обозначения:

$$K = \sqrt{U_1 - U_2}, \quad L = b - a, \quad \cos \gamma = \sqrt{\frac{U_1 - U_2}{U_3 - U_2}} \quad \left(0 < \gamma < \frac{\pi}{2}\right)$$

и новую переменную

$$\xi = \frac{k_2}{K} = \sqrt{\frac{\epsilon - U_2}{U_1 - U_2}}.$$

Уравнение может быть записано в виде условия на  $\xi$ :

$$n\pi - \xi KL = \arcsin \xi + \arcsin(\xi \cos \gamma).$$

Последнее уравнение графически решено на рис. 11. Когда  $\epsilon$  растет от  $U_2$  до  $U_1$ ,  $\xi$  растет от 0 до 1, а правая часть уравнения растет от 0 до  $\pi - \gamma$ , следуя кривой C (которая зависит только от параметра  $\gamma$ ). В то же время

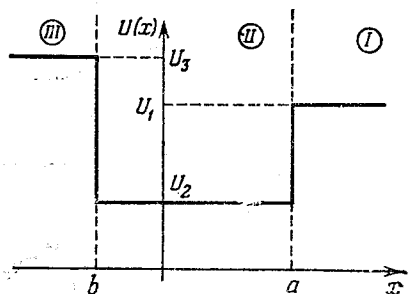


Рис. 10. Конечная прямоугольная потенциальная яма.

левая часть уравнения уменьшается от  $n\pi$  до  $n\pi - KL$ , следуя отрезку прямой  $D_n$ . Чтобы  $C$  и  $D_n$  пересекались, необходимо и достаточно, чтобы целое число  $n$  было достаточно малым:

$$KL \geq (n-1)\pi + \gamma.$$

Если  $KL < \gamma$ , собственных значений нет; если  $\gamma \leq KL \leq \pi + \gamma$ , то существует одно собственное значение  $\epsilon_1$ ; если  $\pi + \gamma \leq KL < 2\pi + \gamma$ , имеется два собственных значения  $\epsilon_1$  и  $\epsilon_2$  ( $\epsilon_1 < \epsilon_2$ ) и т. д. Легко видеть, что собственные значения располагаются в порядке возрастающих  $n$ . Они образуют дискретную и конечную последовательность — от основного собственного значения  $\epsilon_1$

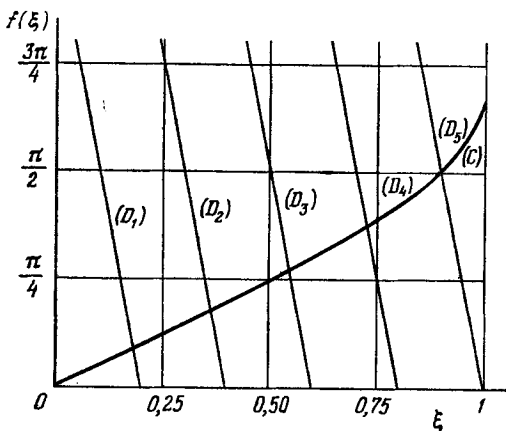


Рис. 11. Графическое решение задачи о дискретных собственных значениях:  $\xi = [(\epsilon - U_2)/(U_1 - U_2)]^{1/2}$ . Собственные значения суть точки пересечения кривой  $(C)$ , заданной уравнением  $f(\xi) = [\arcsin \xi + \arcsin(\xi \cos \gamma)]/\pi$ , и каждой из прямых  $(D_n)$ :  $y(\xi) = n - (KL/\pi)\xi$  (принято  $\gamma = \pi/3$ ,  $KL/\pi = 5$ ).

до максимального собственного значения, соответствующего наибольшему целому числу, не превосходящему  $1 + (KL - \gamma)/\pi$ .

Квантовое число  $n$  имеет вполне определенный математический смысл. Рассмотрение уравнений (19) показывает, что функция  $\sin(k_2x + \varphi)$  обращается в нуль  $n-1$  раз, когда  $x$  пробегает интервал  $(a, b)$ . Но, следуя уравнению (17), нули этой функции совпадают с нулями  $\varphi$ . Следовательно, число узлов собственной функции, соответствующей  $n$ -ому собственному значению  $\epsilon_n$ , есть  $n-1$ .

В заключение можно провести сравнение с классической ситуацией, как это было сделано в случае бесконечно глубокой потенциальной ямы. Теперь помимо квантования энергии следует отметить дополнительное отличие; поскольку волновая функция сохраняет отличные от нуля значения в областях I и III, существует отличная от нуля вероятность найти частицу и в этих областях, куда доступ классической частице полностью запрещен.

б)  $U_1 < \epsilon < U_3$ . *Спектр непрерывный невырожденный. Отражение волны.*

Мы находимся в ситуации, аналогичной случаю а) в задаче о скачке потенциала. Каждому значению  $\epsilon$  соответствует

одно и только одно всюду ограниченное решение, именно то, которое экспоненциально затухает в области III: в интервале  $(U_1, U_3)$  спектр собственных значений непрерывный и невырожденный.

Мы ищем решение в виде

$$\psi = \begin{cases} e^{-ik_1x} + e^{i(k_1x + 2\varphi_1)} & x > a, \\ 2Ae^{i\varphi_1} \sin(k_2x + \varphi_2) & a > x > b, \\ 2Be^{i\varphi_1} e^{\kappa_3 x} & b > x. \end{cases} \quad (21)$$

Как и в предшествующих задачах, условия непрерывности логарифмической производной определяют фазы  $\varphi_1$  и  $\varphi_2$ . Находим

$$\varphi_2 = -k_2b + \operatorname{arctg} \frac{k_2}{\kappa_3},$$

$$\varphi_1 = -k_1a - \frac{\pi}{2} + \operatorname{arctg} \left[ \frac{k_1}{k_2} \operatorname{tg} \left( k_2L + \operatorname{arctg} \frac{k_2}{\kappa_3} \right) \right],$$

в то же время непрерывность самой функции позволяет определить  $A$  и  $B$ .

Далее мы будем предполагать, что  $U_3 - \epsilon \gg \epsilon - U_2$  откуда  $k_2 \ll \kappa_3$  и, следовательно,  $k_1 \ll \kappa_3$ . Все происходит так, как если бы область III характеризовалась бесконечно отталкивающим потенциалом, так что  $B = 0$ . Интересующими нас величинами являются  $\varphi_1$  и  $A^2$ .

Условимся, что  $a = 0$ ,  $b = -L$ , и положим

$$\eta = \frac{k_1}{K} = \sqrt{\xi^2 - 1}.$$

Тогда после элементарного расчета

$$\varphi_1 = \operatorname{arctg} \left( \frac{\eta}{\xi} \operatorname{tg} \xi KL \right) - \frac{\pi}{2},$$

$$A^2 = \frac{\eta^2}{\eta^2 + \cos^2 \xi KL}.$$

При возрастании энергии фаза  $\varphi_1$  более или менее регулярным образом растет, в то время как величина  $A^2$ , измеряющая относительную интенсивность волны в области II, осциллирует между значениями  $\eta^2/(1 + \eta^2)$  и 1. Осцилляции тем более значительны, чем больше  $KL$  и чем меньше  $\eta$ . Поэтому предположим в дальнейшем, что

$$KL \gg \pi, \quad \eta \ll 1.$$

В этом случае  $A^2$  как функция  $\eta^2$  (т. е. энергии) обнаруживает серию острых максимумов ширины  $4\eta/KL$ , отстоящих друг от друга на  $2\pi/KL$ . На рис. 12 показано это замечательное поведение  $A^2$ , а также  $\varphi_1$  в условиях нашего приближения.

Мы сталкиваемся с явлением типично волнового характера, с явлением *резонанса*. Для некоторых ограниченных областей изменения энергии (ширины  $4\eta/KL$ ) интенсивность волны во внутренней области порядка 1: эти резонансные энергии соответствуют условию  $\varphi_2 = (n + 1/2)\pi$ , т. е. область *II* содержит

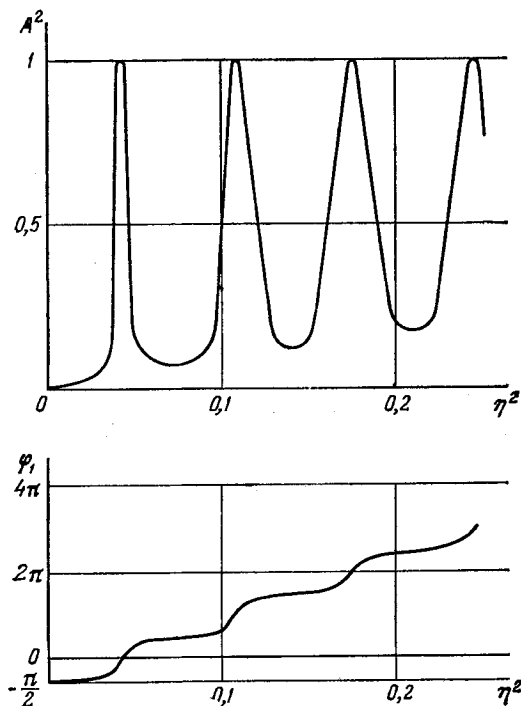


Рис. 12. Резонансы отражений. Изменение  $A^2$  и  $\varphi_1$  (см. уравнение (21)) в зависимости от энергии. Кривые соответствуют  $KL = (b - a)\sqrt{U_1 - U_2} = 100$ . По оси абсцисс отложена переменная  $\eta^2 = (e - U_1)/(U_1 - U_2)$

$n + 1/2$  «полуволн». Вне этих резонансных областей интенсивность очень мала.

Как и в случае задачи со скачком потенциала, мы можем сравнить движение волнового пакета типа (9) с движением классической частицы в том же потенциале. Приходя из  $+\infty$  с постоянной скоростью  $v_1 = (\hbar K/m)\eta$ , классическая частица испытывает резкое ускорение при  $x = 0$ , пробегает область *II* со скоростью  $v_2 = (\hbar K/m)\sqrt{1 + \eta^2}$ , отражается в точке  $x = -L$ , движется в противоположном направлении со скоростью  $v_2$  в области *II*, затем со скоростью  $v_1$  в области *I*. Время, кото-

рое классическая частица проводит в области  $II$ , равно  $\tau_{кл} = 2L/v_2$ . Центр волнового пакета движется аналогичным образом, по крайней мере в области очень больших  $x$ , где пакет не слишком сильно деформирован, так что понятие его центра сохраняет смысл. Все происходит так, как если бы он осуществил то же самое движение за исключением того, что «время, проведенное в области  $II$ » равно не  $\tau_{кл}$ , а  $\tau = (2/v_1) d\varphi/dk_1 = (2/v_1 K) d\varphi_1/d\eta$ . Мы не будем вдаваться в детали этого исследования, вполне аналогичного проведенному на стр. 89. Поведение различных величин, упоминавшихся выше, сведено в следующую таблицу:

Начальная энергия	$\varphi_1$	$\frac{d\varphi_1}{dk_1}$	$\frac{\tau}{\tau_{кл}}$	$A^2$
В резонансе	$n\pi$	$L$	$\frac{1}{\eta}$	1
Посередине между двумя резонансами	$(n + \frac{1}{2})\pi$	$L\eta^2$	$\eta$	$\eta^2$

Между резонансами  $A^2$  остается очень малой величиной, время прохождения области  $II$   $\tau$  мало по сравнению с  $\tau_{кл}$ : волновой пакет практически не проникает в область  $II$ , волна почти полностью отражается от точки  $x=0$ . Эта ситуация аналогична оптической, где резкое и значительное изменение показателя почти всегда вызывает полное отражение. Наоборот, в резонансе  $A^2 = 1$ , волна полностью проникает в область  $II$  и остается там относительно долгий промежуток времени, значительно больший  $\tau_{кл}$ . Согласно условию (12) полученная картина справедлива только для достаточно пространственно протяженных пакетов, больших чем размеры области  $II$  ( $(d\varphi_1/dk_1) = L$  в резонансе), и, следовательно, передний фронт волнового пакета достигает точки отражения  $x = -L$  значительно раньше того, как волна завершит прохождение точки скачка потенциала  $x=0$ . Этот эффект имеет чисто волновую природу — происходит интерференция между падающей и отраженной волнами в области  $II$ .

в)  $\epsilon > U_3$ . Спектр непрерывный и вырожденный. Отражение и прохождение волн.

Эта ситуация аналогична случаю б) в задаче со скачком потенциала. Всякому значению  $\epsilon$  соответствуют две линейно независимые собственные функции: в интервале  $(U_3, \infty)$  спектр собственных значений непрерывен и все собственные значения дважды вырождены.

Как и в задаче со скачком потенциала построим собственную функцию в виде

$$\chi = \begin{cases} e^{-ik_1x} + Re^{ik_1x} & x > a, \\ Pe^{-ik_2x} + Qe^{ik_2x} & a > x > b, \\ Se^{-ik_3x} & b > x. \end{cases} \quad (22)$$

Условия непрерывности в точках  $a$  и  $b$  позволяют определить  $R$ ,  $Q$ ,  $P$  и  $S$ . Не входя в детали вычислений, приведем результаты для величин  $R$  и  $S$ . Используем следующие обозначения:

$$a = 0 \quad b = -L, \quad K = \sqrt{U_1 - U_2}, \\ \xi = \frac{k_2}{K}, \quad \eta = \frac{k_1}{K}, \quad \zeta = \frac{k_3}{K}.$$

Получаем

$$R = \frac{\xi(\eta - \zeta) \cos \xi KL + i(\xi^2 - \eta\zeta) \sin \xi KL}{\xi(\eta + \zeta) \cos \xi KL - i(\xi^2 + \eta\zeta) \sin \xi KL}, \\ S = e^{-i\zeta KL} \frac{2\eta\xi}{\xi(\eta + \zeta) \cos \xi KL - i(\xi^2 + \eta\zeta) \sin \xi KL}.$$

Эти выражения позволяют сравнить движение волнового пакета, образованного из волн типа (22) с близкими энергиями, с движением классической частицы той же энергии в том же потенциале.

Начальный волновой пакет (образованный в области  $I$  из волн  $e^{-ik_1x}$ ) перемещается в области  $I$  с постоянной скоростью  $v_1 = \hbar k_1/m$  и встречается с областью  $II$ ; после столкновения он разделяется на пакет отраженных волн (образованный волнами  $Re^{ik_1x}$  в области  $I$ ), перемещающийся со скоростью  $v_1$  к  $+\infty$ , и пакет проходящих волн (образованный волнами  $Se^{-ik_3x}$  в области  $III$ ), перемещающийся со скоростью  $v_3$  к  $-\infty$ . Таким образом, в отличие от классической частицы волновой пакет всегда только частично проходит в область  $III$ , и можно определить коэффициент прохождения

$$T = \frac{k_3}{k_1} |S|^2 = \frac{4\eta\xi^2}{\xi^2(\eta + \zeta)^2 \cos^2 \xi KL + (\xi^2 + \eta\zeta)^2 \sin^2 \xi KL}, \quad (23)$$

как мы это уже делали в случае скачка потенциала.

Здесь мы тоже замечаем, что при равной энергии коэффициент прохождения не зависит от направления движения ( $\eta$  и  $\xi$  входят симметрично в выражение для  $T$ ). Можно проверить и равенство

$$|R|^2 + \frac{k_3}{k_1} |S|^2 = 1. \quad (24)$$

Относительная величина отраженной и проходящей волн изменяется с энергией и можно обнаружить существование явлений резонанса того же типа, что и в случае б). Они особенно заметны когда  $KL \gg \pi$ ,  $\xi < \eta \ll 1$  (т. е.  $\xi = 1$ ). В этом случае видно при исследовании уравнения (23), что коэффициент прохождения, рассматриваемый как функция  $\eta^2$  (т. е. как функция энергии), остается очень малым (порядка  $4\eta\xi$ ) почти всюду, но обнаруживает серию резких максимумов, равных  $4\pi\xi/(\eta + \zeta)^2$ . Ширина этих максимумов равна примерно  $4(\eta + \zeta)/KL$ . Положения максимумов соответствуют энергиям, для которых в области  $II$  укладывается целое число  $n$  «половолн», а именно  $\xi KL = n\pi$  (расстояние между максимумами около  $2\pi/KL$ ).



Можно продолжить это исследование, рассматривая фазы амплитуд  $R$  и  $S$ , определить «время прохождения» проходящей волны или «время отражения» отраженной волны и сравнить эти величины со временем пересечения области  $II$  классической частицей. Качественно получается следующая картина: в резонансе волна остается концентрированной в области  $II$  в течение промежутка времени, значительно (в  $(\eta + \zeta)^{-1}$  раз) превосходящего классическое время, прежде чем разделиться на проходящую и отраженную волны; вне резонанса волна практически не проникает в область  $II$ , она почти полностью отражается на границе областей  $I$  и  $II$  причем почти мгновенно (см. задачу 1).

### § 7. Прохождение прямоугольного потенциального барьера. Туннельный эффект

В качестве последнего примера рассмотрим прохождение прямоугольного потенциального барьера (рис. 13)

$$U(x) = \begin{cases} 0 & x > L & \text{(область I).} \\ U_0 (> 0) & 0 < x < L & \text{(область II),} \\ 0 & x < 0 & \text{(область III).} \end{cases}$$

В этом случае все положительные значения  $\varepsilon$  являются собственными значениями, двукратно вырожденными. Следует рассмотреть две возможности:  $\varepsilon$  может быть больше или меньше  $U_0$ . В обоих случаях образуем решение, представляющее в области  $III$  волну, распространяющуюся в отрицательном направлении, т. е. решение вида  $e^{-i\sqrt{\varepsilon}x} + Re^{i\sqrt{\varepsilon}x}$  для  $x > L$  и  $Se^{-i\sqrt{\varepsilon}x}$  для  $x < 0$ .

Ее поведение в области  $II$ : экспоненциальное:  $Ae^{\kappa x} + Be^{-\kappa x}$ , если  $\varepsilon < U_0$  ( $\kappa = \sqrt{U_0 - \varepsilon}$ );

синусоидальное:  
 $Ce^{ikx} + De^{-ikx}$ , если  $\varepsilon > U_0$

$$(k = \sqrt{\varepsilon - U_0}).$$

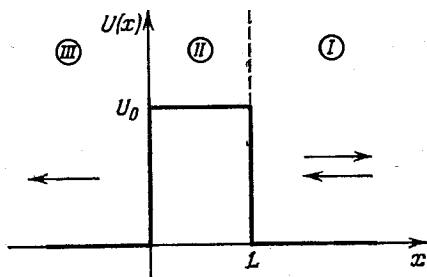


Рис. 13. Прямоугольный барьер

Ограничимся тем, что дадим результат вычисления коэффициента прохождения (рис. 14):

$$T = |S|^2 = \begin{cases} \frac{4\varepsilon(\varepsilon - U_0)}{4\varepsilon(\varepsilon - U_0) + U_0^2 \sin^2 kL}, & \text{если } \varepsilon > U_0; \\ \frac{4\varepsilon(U_0 - \varepsilon)}{4\varepsilon(U_0 - \varepsilon) + U_0^2 \operatorname{sh}^2 \kappa L}, & \text{если } \varepsilon < U_0. \end{cases}$$

Как и в предшествующих параграфах, можно сравнить движение волнового пакета типа (9), образованного из написанных

выше волн, с движением классической частицы, приходящей из  $+\infty$ .

Наиболее показательное различие имеет место при  $\epsilon < U_0$ . Классическая частица отражается от барьера, не имея возможности его преодолеть. Волновой пакет разделяется на отраженный пакет и пакет проходящий, причем интенсивность последнего никогда не обращается в нуль. При возрастании  $\epsilon$  от

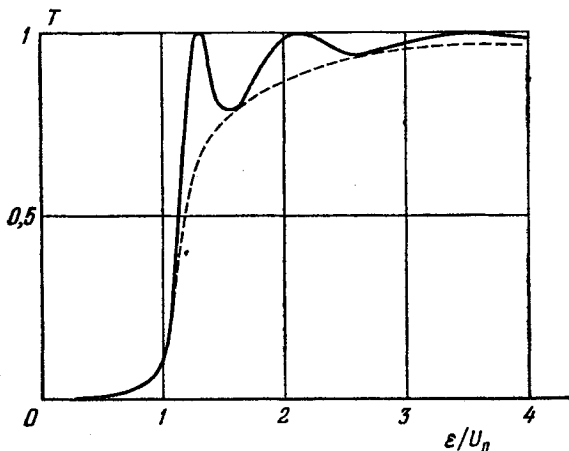


Рис. 14. Изменение коэффициента прохождения в зависимости от энергии для потенциального барьера, показанного на рис. 13. Принято  $U_0 L^2 = 40$ .

нуля до  $U_0$  коэффициент прохождения монотонно растет от нуля до значения  $(1 + U_0 L^2/4)^{-1}$ . Явление прохождения частицей потенциального барьера называется *туннельным эффектом* и играет важную роль в теории радиоактивного  $\alpha$ -распада. Величина туннельного эффекта тем больше, чем меньше высота барьера и его ширина.

Когда  $\epsilon > U_0$ , классическая частица замедляется в области II, но тем не менее пересекает ее и продолжает свой путь в области III в направлении  $-\infty$ . Волновой пакет всегда, хотя бы частично, отражается. Полное прохождение ( $T = 1$ ) имеет место только при некоторых значениях энергии, когда  $kL$  равно целому числу  $\pi$ . При росте энергии коэффициент прохождения колеблется между этим максимальным значением и минимальным, равным  $4\epsilon(\epsilon - U_0)/(2\epsilon - U_0)^2$ . Эффект особенно заметен, когда барьер очень высок или очень широк и когда кинетическая энергия  $\epsilon - U_0$  в области II мала. Можно отметить сходство с резонансными явлениями, обсуждавшимися в предшествующих параграфах (см. задачу 2).