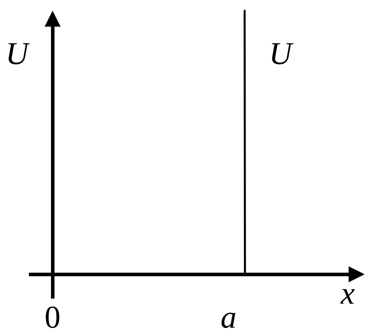
Лекции 5 - 6. Стационарные задачи квантовой механики.

Частица в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. Частица в трехмерном прямоугольном потенциальном ящике. Понятие о вырождении энергетических уровней. Одномерный потенциальный порог и барьер. Туннельный эффект. Сканирующий туннельный микроскоп. Гармонический осциллятор.

Задача о бесконечно глубокой потенциальной яме.

Частица массы m находится в ограниченной одномерной области, за пределы которой она проникнуть не может. Внутри области нет потенциальной энергии (U=0), а снаружи потенциальная энергия принимает бесконечно большие значения. Поэтому на границе области на частицу действует бесконечно большая возвращающая сила. (Говорят, что стенки ямы непроницаемые для частицы – т.е. частица находится в бесконечно глубокой потенциальной яме).



Математическая постановка задачи

Область $\Omega = \left\{ x \in \mathbb{R} \middle| 0 < x < a \right\}$.

Потенциальная энергия $U(x) = \begin{cases} 0, & x \in \Omega \\ +\infty, & x \notin \Omega \end{cases}$

Т.к. частица не может выйти из ямы, то волновая функция частицы вне ямы равна нулю $\Psi(x) = 0$ при $x \notin \Omega$.

Следовательно, ввиду непрерывности волновой функции, на границе ямы волновая функция должна обращаться в ноль $\Psi(0) = 0$ и $\Psi(a) = 0$.

Поэтому и координатная часть волновой функции тоже обращается в ноль в граничных точках

$$\psi(0) = 0 \text{ и } \psi(a) = 0.$$

Координатная часть является решением уравнения Шрёдингера для стационарного состояния $\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\cdot\psi = 0$, которое в одномерном случае для области внутри ямы примет вид

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\cdot\psi = 0.$$

Если ввести обозначение $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E$, то уравнение $\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\cdot\psi = 0$ имеет решение в виде $\psi = A\cdot sin(kx + \alpha)$. Для поиска значений постоянных A и α поставляем граничные условия.

$\psi(0) = A\cdot sin(\alpha) = 0$ откуда следует, что можно принять $\alpha = 0$.

$\psi(a) = A\cdot sin(ka) = 0$. Это значит, что $ka = n\pi$, где $n = 1,2,3,...$, т.е. $k = \frac{n\pi}{a}$

Поэтому решение примет вид $\psi = A\cdot sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$.

Для поиска значения A используем условие нормировки $P(0 < x < a) = \int_0^a |\psi|^2\,dx = 1$

Но

$$\int_0^a |\psi|^2\,dx = \int_0^a |A|^2\cdot sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx = |A|^2\int_0^a \cdot\frac{1 - cos\left(\frac{2n\pi}{a}x\right)}{2}dx = \frac{|A|^2}{2}\left(x - \frac{a}{2n\pi}sin\left(\frac{2n\pi}{a}x\right)\right)\Bigg|_0^a = \frac{|A|^2}{2}a$$

Поэтому $\left|A\right|^2=\dfrac{2}{a}$. В данной задаче нет комплексных чисел, поэтому можно считать, что число *A* является действительным и положительным, т.е. $A=\sqrt{\dfrac{2}{a}}$. Тогда $\psi_n=\sqrt{\dfrac{2}{a}}\cdot sin\left(\dfrac{n\pi}{a}x\right)$.

Значения энергии частицы определяются из соотношения $k^2=\dfrac{2m}{\hbar^2}E=\left(\dfrac{n\pi}{a}\right)^2$, т.е.

$E=\dfrac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2$ энергия зависит от номера *n*. Целое число *n*, определяющее значение энергии частицы называется *главным квантовым числом*.

В итоге, любому натуральному числу *n* соответствует решение $\psi_n=\sqrt{\dfrac{2}{a}}sin\left(\dfrac{n\pi}{a}x\right)$ и значение энергии $E_n=\dfrac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2$. Пси-функция $\Psi_n=\psi_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$.

Энергия частицы в бесконечно глубокой яме принимает дискретные значения, или, как говорят, *квантуется*.

Случай *n*=0 не рассматриваем, т.к. при *n*=0 получаем, что $\psi_0=0$, т.е. частицы нет в яме. Состояние частицы с минимальным значением энергии (*n*=1) называется *основным состоянием*. Остальные состояния (для *n*>1) – *возбужденными*: *n*=2 – *первое возбуждённое состояние*, *n*=3 – *второе возбуждённое состояние* и т.д.

Разность соседних уровней энергии при больших значениях

$$\Delta E=E_{n+1}-E_n=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}(n+1)^2-\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}(2n+1)\approx\frac{\pi^2\hbar^2}{ma^2}n$$

пропорциональна номеру *n*.

Для молекулы газа с массой $m\sim10^{-27}$ кг в области с размером $a\sim0{,}1$ м эта разность равна $\Delta E\sim10^{-38}n$ Дж или $\Delta E\sim10^{-19}n$ эВ. Учитывая, что при T=300 К энергия теплового движения порядка $E_T\sim10^{-21}$ Дж, то дискретностью уровней энергии частицы можно пренебречь. Но для электрона $m=9{,}1\cdot10^{-31}$ в области $a\sim10^{-10}$ м (порядок размера атома) $\Delta E\sim10^{-17}n$ Дж, что уже соизмеримо со значением тепловой энергии.

Замечание. Найдем вектор плотности вероятности для частицы в яме.

$$\vec{j}=\frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi grad\Psi^*-\Psi^*grad\Psi\right).$$

Т.к. задача одномерная, то $\vec{j}=\left(j_x,0,0\right)$, где $j_x=\dfrac{i\hbar}{2m}\left(\Psi\dfrac{\partial\Psi^*}{\partial x}-\Psi^*\dfrac{\partial\Psi}{\partial x}\right)$.

Из $\Psi_n=\psi_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$ следует $j_x=\dfrac{i\hbar}{2m}\left(\psi_n\dfrac{\partial{\psi^*}_n}{\partial x}-{\psi^*}_n\dfrac{\partial\psi_n}{\partial x}\right)$.

Из вещественности решения $\psi_n={\psi^*}_n=\sqrt{\dfrac{2}{a}}sin\left(\dfrac{n\pi}{a}x\right)$ следует, что

$$j_x=\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi_n\frac{\partial{\psi^*}_n}{\partial x}-{\psi^*}_n\frac{\partial\psi_n}{\partial x}\right)=0$$

Т.е. вероятность нахождения частицы в яме не изменяется с течением времени.

Частица в трёхмерной потенциальной яме с непроницаемыми стенками.

Частица массы *m* находится в трёхмерной области, за пределы которой она проникнуть не может. Внутри области нет потенциальной энергии (*U*=0), а снаружи потенциальная энергия принимает бесконечно большие значения. Поэтому на границе области на частицу действует бесконечно большая возвращающая сила.

Математическая постановка задачи

Область $\Omega=\left\{(x,y,z)\middle|0<x<a,0<y<b,0<z<c\right\}$.

Потенциальная энергия $U(x,y,z)=\begin{cases}0, & (x,y,z)\in\Omega\\ +\infty, & (x,y,z)\notin\Omega\end{cases}$.

Т.к. частица не может выйти из ямы, то волновая функция частицы вне ямы равна нулю $\Psi(x,y,z)=0$ при $(x,y,z)\notin\Omega$. Следовательно, на границе ямы волновая функция должна обращаться в нуль

$$\Psi(0,y,z)=0 \text{ и } \Psi(a,y,z)=0;$$
$$\Psi(x,0,z)=0 \text{ и } \Psi(x,b,z)=0;$$
$$\Psi(x,y,0)=0 \text{ и } \Psi(x,y,c)=0;$$

Поэтому и координатная часть волновой функции тоже обращается в ноль в граничных точках.

Координатная часть является решением уравнения Шрёдингера для стационарного состояния $\Delta\psi+\frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\cdot\psi=0$, которое в трёхмерном случае для области внутри ямы примет вид

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}+\frac{2m}{\hbar^2}E\cdot\psi=0.$$

Решение ищем в виде произведения трех функций, каждая из которых зависит только от одной из координат $\psi=A\cdot X(x)\cdot Y(y)\cdot Z(z)$. После подстановки

$$A\cdot X''_{xx}\cdot Y\cdot Z+A\cdot X\cdot Y''_{yy}\cdot Z+A\cdot X\cdot Y\cdot Z''_{zz}+\frac{2m}{\hbar^2}E\cdot A\cdot X\cdot Y\cdot Z=0$$

разделим на $A\cdot X\cdot Y\cdot Z$. Тогда в полученном уравнении

$$\frac{X''_{xx}}{X}+\frac{Y''_{yy}}{Y}+\frac{Z''_{zz}}{Z}+\frac{2m}{\hbar^2}E=0.$$

Первые три слагаемые зависят от трёх разных аргументов, но сумма является постоянным числом. Это возможно, если каждое из слагаемых – постоянное число. Например,

$$\frac{X''_{xx}}{X}=-k_1^2,\ \frac{Y''_{yy}}{Y}=-k_2^2,\ \frac{Z''_{zz}}{Z}=-k_3^2.$$

Решения этих уравнений должны быть ограниченными, поэтому константы – отрицательные. Исходное уравнение от трех переменных распадается на три одномерных уравнения. Решая их с учётом граничных условий как в предыдущем случае, получаем решения

$$k_1=\frac{n_1\pi}{a},\ k_2=\frac{n_2\pi}{b},\ k_3=\frac{n_3\pi}{c}.$$

$$X=\sqrt{\frac{2}{a}}\cdot sin\left(\frac{n_1\pi}{a}x\right),\ Y=\sqrt{\frac{2}{b}}\cdot sin\left(\frac{n_2\pi}{b}y\right),\ Z=\sqrt{\frac{2}{c}}\cdot sin\left(\frac{n_3\pi}{c}z\right).$$

$$\psi=\sqrt{\frac{8}{abc}}\cdot sin\left(\frac{n_1\pi}{a}x\right)\cdot sin\left(\frac{n_2\pi}{b}y\right)\cdot sin\left(\frac{n_3\pi}{c}z\right).$$

Из равенства $-k_1^2-k_2^2-k_3^2+\frac{2m}{\hbar^2}E=0$ находим выражение для энергии

$$E=\frac{\hbar^2}{2m}\left(k_1^2+k_2^2+k_3^2\right)=\frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_1^2}{a^2}+\frac{n_2^2}{b^2}+\frac{n_3^2}{c^2}\right).$$

Откуда видно, что в этом случае тоже энергия принимает дискретные значения.

Предположим, что яма является кубической, т.е. $a = b = c$. Тогда из выражения для энергии

$$E = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\left(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2\right)$$

видно, что возможны случаи, когда одному значению энергию соответствуют различные пси-функции.

Определение. Совокупность (различных) состояний, в которых частица имеет одинаковое значение энергии, называется *вырожденным состоянием*. Количество таких состояний (для одного и того же значения энергии) называется *кратностью вырождения* уровня энергии. Если кратность уровня энергии равна единице, то говорят, что уровень энергии *не вырожден*.

Пример. Найдём кратность вырождения уровней энергии (с 1-го по 6-й) в кубической потенциальной яме.

Вид пси-функции определяется набором трех натуральных чисел (n_1, n_2, n_3)

$$\psi = \sqrt{\frac{8}{abc}} \cdot sin\left(\frac{n_1\pi}{a}x\right) \cdot sin\left(\frac{n_2\pi}{a}y\right) \cdot sin\left(\frac{n_3\pi}{a}z\right),$$

а значение энергии зависит от «квадрата длины набора» $\left(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2\right)$:

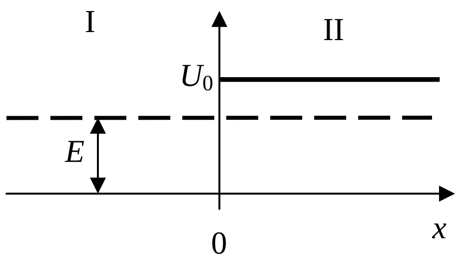
$$E = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\left(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2\right).$$

Значения энергии упорядочиваем по величине.

Кратность вырождения равна числу наборов «одной длины».

№	Наборы чисел (n_1, n_2, n_3)	Значение энергии	Кратность вырождения
1	$(1,1,1)$	$E_1 = \frac{3\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$	1
2	$(2,1,1)$, $(1,2,1)$, $(1,1,2)$	$E_2 = \frac{3\pi^2\hbar^2}{ma^2}$	3
3	$(2,2,1)$, $(1,2,2)$, $(2,1,2)$	$E_3 = \frac{9\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$	3
4	$(3,1,1)$, $(1,3,1)$, $(1,1,3)$	$E_4 = \frac{11\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$	3
5	$(2,2,2)$	$E_5 = \frac{6\pi^2\hbar^2}{ma^2}$	1
6	$(1,2,3)$, $(2,1,3)$, $(1,3,2)$, $(3,1,2)$, $(3,2,1)$, $(2,3,1)$	$E_6 = \frac{7\pi^2\hbar^2}{ma^2}$	6

Падение частицы на потенциальный порог.



1. Частица массы m с энергией E движется вдоль оси X, сначала в области I, где потенциальная энергия меньше энергии частицы, и налетает на область II, в которой потенциальная энергия больше энергии частицы $U_0>E$. Для области I пусть $x<0$, а для области II $x>0$.Примем зависимость потенциальной энергии в виде

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x<0 \\ U_0, & x>0 \end{cases}$$

Уравнение Шрёдингера для стационарного состояния в области I:

$$\frac{d^2\psi_I}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}E\cdot\psi_I=0.$$

Соответственно, решение $\psi_I=C_1e^{ik_1x}+C_2e^{-ik_1x}$, где $k_1^2=\frac{2m}{\hbar^2}E$.

В области I решение является суперпозицией *падающей* на порог и *отраженной* от порога волн:

$$\psi_I=\psi_I^{ПАД}+\psi_I^{ОТР}.$$

Т.к. уравнение падающей (в положительном направлении оси X) на преграду волны де Бройля должно иметь вид

$$\Psi^{ПАД}=C_1\cdot e^{-i\left(\frac{E_n}{\hbar}t-k_1x\right)}=C_1\cdot e^{ik_1x}\cdot e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t},$$

то в решении для области I падающей волне соответствует координатная часть $\psi_I^{ПАД}=C_1e^{ik_1x}$.

Соответственно, отражённую волну де Бройля описывает $\psi_I^{ОТР}=C_2e^{-ik_1x}$.

Для области II:

$$\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2}-\frac{2m}{\hbar^2}(U_0-E)\cdot\psi_{II}=0$$

решение имеет вид $\psi_{II}=C_3e^{-k_2x}+C_4e^{k_2x}$, где $k_2=\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(U_0-E)}$.

Оставляем только решение, убывающее при $x\to+\infty$. (Этому соответствует условие того, что вероятность нахождения частицы внутри барьера убывает с глубиной.) Поэтому прошедшая волна $\psi_{II}^{ПРОШ}=C_3e^{-k_2x}$.

Граничным условием является непрерывность функции ψ и её первой производной ψ'_x на границе барьера

$$\psi_I(0)=\psi_{II}(0),\ \frac{d\psi_I}{dx}(0)=\frac{d\psi_{II}}{dx}(0).$$

откуда получаем систему для определения коэффициентов $\begin{cases}C_1+C_2=C_3\\ ik_1C_1-ik_1C_2=-k_2C_3\end{cases}$.

Решение этой системы имеет вид $C_2=\frac{(k_2+ik_1)}{(ik_1-k_2)}C_1$, $C_3=\frac{2ik_1}{(ik_1-k_2)}C_1$.

Эффективной глубиной L проникновения частицы в область порога называется расстояние от границы порога, на котором плотности вероятности уменьшается в *e* раз.

$$\frac{\left|\psi_{II}^{ПРОШ}(0)\right|^2}{\left|\psi_{II}^{ПРОШ}(L)\right|^2}=\frac{|C_3|^2}{\left|C_3e^{-k_2L}\right|^2}=e$$

$$e^{2k_2L}=e,\ 2k_2L=1,\ L=\frac{1}{2k_2}=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\hbar^2}{2m(U_0-E)}}.$$

Замечание. Из последней формулы следует, что при увеличении «высоты» порога $U_0\to\infty$ эффективная глубина уменьшается $L\to 0$.

Найдём плотность потока вероятности падающей волны

$$j_x^{ПАД}=\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi^{ПАД}\frac{\partial\left(\psi^{ПАД}\right)^*}{\partial x}-\left(\psi^{ПАД}\right)^*\frac{\partial\psi^{ПАД}}{\partial x}\right)=\frac{i\hbar}{2m}\left(C_1e^{ik_1x}\frac{\partial\left(C_1e^{ik_1x}\right)^*}{\partial x}-\left(C_1e^{ik_1x}\right)^*\frac{\partial\left(C_1e^{ik_1x}\right)}{\partial x}\right)=$$

$$=\frac{i\hbar}{2m}\left(C_1C_1^*e^{ik_1x}(-ik_1)e^{-ik_1x}-\left(C_1^*C_1e^{-ik_1x}\right)(ik_1)e^{ik_1x}\right)=-2ik_1\frac{i\hbar}{2m}|C_1|^2$$

Плотность потока вероятности отраженной волны

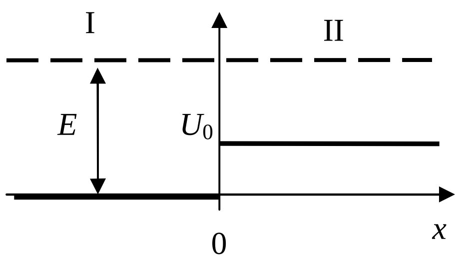
$$j_x^{OTP} = \frac{i\hbar}{2m}\left(\psi^{OTP}\frac{\partial\left(\psi^{OTP}\right)^*}{\partial x} - \left(\psi^{OTP}\right)^*\frac{\partial\psi^{OTP}}{\partial x}\right) = \frac{i\hbar}{2m}\left(C_2e^{-ik_1x}\frac{\partial\left(C_2e^{-ik_1x}\right)^*}{\partial x} - \left(C_2e^{-ik_1x}\right)^*\frac{\partial\left(C_2e^{-ik_1x}\right)}{\partial x}\right) =$$

$$= \frac{i\hbar}{2m}\left(C_2C_2^*e^{-ik_1x}ik_1e^{ik_1x} - \left(C_2^*C_2e^{ik_1x}\right)\left(-ik_1\right)\left(e^{-ik_1x}\right)\right) = 2ik_1\frac{i\hbar}{2m}\left|C_2\right|^2$$

Коэффициент отражения от порога равен $R = \frac{\left|\vec{j}^{\,OTP}\right|}{\left|\vec{j}^{\,ПАД}\right|} = \frac{\left|2ik_1\frac{i\hbar}{2m}\right|\left|C_2\right|^2}{\left|2ik_1\frac{i\hbar}{2m}\right|\left|C_1\right|^2} = \left|\frac{C_2}{C_1}\right|^2 = \left|\frac{k_2+ik_1}{ik_1-k_2}\right|^2 = 1$

т.е. частица отражается от порога полностью.

2. Теперь рассмотрим случай, когда энергия частицы больше высоты порога $E>U_0$. Пусть опять



$$U\left(x\right) = \begin{cases} 0, & x<0 \\ U_0, & x>0 \end{cases}.$$

Уравнение Шрёдингера для стационарного состояния в области I:

$$\frac{d^2\psi_I}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\cdot\psi_I = 0$$

Соответственно, решение $\psi_I = C_1e^{ik_1x} + C_2e^{-ik_1x}$, где $k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E$.

В области I решение является суперпозицией *падающей* на барьер и *отраженной* от порога волн:

$$\psi_I = \psi_I^{ПАД} + \psi_I^{OTP}$$

для области I падающей волне соответствует координатная часть $\psi_I^{ПАД} = C_1e^{ik_1x}$, а отражённой $\psi_I^{OTP} = C_2e^{-ik_1x}$.

Для области II:

$$\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E-U_0\right)\cdot\psi_{II} = 0$$

решение имеет вид $\psi_{II} = C_3e^{-ik_2x} + C_4e^{ik_2x}$, где $k_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-U_0\right)}$.

Оставляем только прошедшую волну $\psi_{II}^{ПРОШ} = C_3e^{ik_2x}$.

Граничным условием является непрерывность функции ψ и её первой производной ψ'_x на границе порога

$$\psi_I\left(0\right) = \psi_{II}\left(0\right),\ \frac{d\psi_I}{dx}\left(0\right) = \frac{d\psi_{II}}{dx}\left(0\right).$$

откуда получаем систему для определения коэффициентов

$$\begin{cases} C_1 + C_2 = C_3 \\ k_1C_1 - k_1C_2 = k_2C_3 \end{cases}.$$

Решение этой системы имеет вид $C_2 = \frac{\left(k_1-k_2\right)}{\left(k_1+k_2\right)}C_1$, $C_3 = \frac{2k_1}{k_2+k_1}C_1$.

Плотность потока вероятности падающей волны $j_x^{ПАД} = -2ik_1\frac{i\hbar}{2m}\left|C_1\right|^2$.

Плотность потока вероятности отраженной волны $j_x^{OTP} = 2ik_1\frac{i\hbar}{2m}\left|C_2\right|^2$.

Плотность потока вероятности прошедшей волны $j_x^{ПРОШ} = 2ik_1 \frac{i\hbar}{2m}\left|C_3\right|^2$.

Коэффициент отражения от порога $R = \frac{\left|\vec{j}^{\,ОТР}\right|}{\left|\vec{j}^{\,ПАД}\right|} = \left|\frac{C_2}{C_1}\right|^2 = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2$ не равен нулю!

Это означает, что в отличие от классического случая, когда при $E>U_0$ частица обязательно преодолеет «горку», в квантовой механике существует ненулевая вероятность того, что частица отразится от «горки» при $E>U_0$.

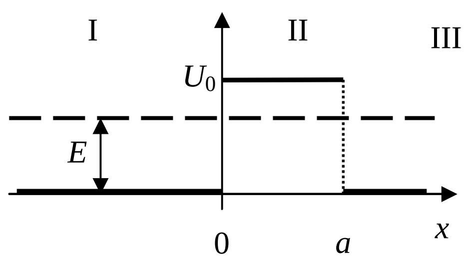
Коэффициент прохождения (прозрачности) порога определяется по аналогии

$$D = \frac{\left|\vec{j}^{\,ПРОШ}\right|}{\left|\vec{j}^{\,ПАД}\right|} = \left|\frac{C_3}{C_1}\right|^2 = \left(\frac{2k_1}{k_1 + k_2}\right)^2.$$

В частности, получаем что $R + D = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2 + \left(\frac{2k_1}{k_1 + k_2}\right)^2 = 1$.

Прохождение частицы через потенциальный барьер.

Из результатов п.1 предыдущей задачи следует, что вероятность обнаружения частицы внутри порога при $E<U_0$ на некотором расстоянии от «ступеньки» не равна нулю. Поэтому возможна ситуация, при которой частица преодолеет конечную область с потенциальной энергией U_0, хотя энергия частицы меньше $E<U_0$.



Частица массы m с энергией E движется вдоль оси x, сначала в области I ($x<0$) , где потенциальная энергия меньше энергии частицы, и налетает на область II, в которой потенциальная энергия больше энергии частицы $U_0>E$. В отличие от предыдущей задачи, будем предполагать, что протяженность области II конечная $0 < x < a$. Далее простирается область III ($x > a$), где энергия частицы больше потенциальной энергии. Примем зависимость потенциальной энергии в виде

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ U_0, & 0 < x < a \\ 0, & x > a \end{cases}$$

Уравнение Шрёдингера для стационарного состояния в области I:

$$\frac{d^2\psi_I}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E \cdot \psi_I = 0$$

Соответственно, решение $\psi_I = C_1 e^{ik_1 x} + C_2 e^{-ik_1 x}$, где $k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E$.

В области I решение является суперпозицией *падающей* на барьер и *отраженной* от барьера волн:

$$\psi_I = \psi_I^{ПАД} + \psi_I^{ОТР}$$

Для области II:

$$\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E) \cdot \psi_{II} = 0$$

решение имеет вид $\psi_{II} = C_3 e^{-k_2 x} + C_4 e^{k_2 x}$, где $k_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E)}$.

В области III

$$\frac{d^2\psi_{III}}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E \cdot \psi_{III} = 0.$$

Общий вид решения $\psi_{III} = C_5 e^{ik_1 x} + C_6 e^{-ik_1 x}$. Отставляем только прошедшую волну $\psi_{III} = C_5 e^{ik_1 x}$. Граничным условием является непрерывность функции ψ и её первой производной ψ'_x на границе барьера

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0),\ \frac{d\psi_I}{dx}(0) = \frac{d\psi_{II}}{dx}(0),$$

$$\psi_{II}(a) = \psi_{III}(a),\ \frac{d\psi_{II}}{dx}(a) = \frac{d\psi_{III}}{dx}(a).$$

откуда получаем систему для определения коэффициентов

$$\begin{cases} C_1 + C_2 = C_3 + C_4 \\ ik_1 C_1 - ik_1 C_2 = -k_2 C_3 + k_2 C_4 \\ C_3 e^{-k_2 a} + C_4 e^{k_2 a} = C_5 e^{ik_1 a} \\ -k_2 C_3 e^{-k_2 a} + k_2 C_4 e^{k_2 a} = ik_1 C_5 e^{ik_1 a} \end{cases}.$$

Решение этой системы имеет вид $C_3 = \dfrac{(k_2 - ik_1) e^{k_2 a} e^{ik_1 a}}{2k_2} C_5$, $C_4 = \dfrac{(k_2 + ik_1) e^{-k_2 a} e^{ik_1 a}}{2k_2} C_5$

$$2ik_1 C_1 = -(k_2 - ik_1) C_3 + (k_2 + ik_1) C_4 = -(k_2 - ik_1) \frac{(k_2 - ik_1) e^{k_2 a} e^{ik_1 a}}{2k_2} C_5 + (k_2 + ik_1) \frac{(k_2 + ik_1) e^{-k_2 a} e^{ik_1 a}}{2k_2} C_5$$

$$C_5 = \frac{4ik_1 k_2 e^{-ik_1 a}}{\left((k_2 + ik_1)^2 e^{-k_2 a} - (k_2 - ik_1)^2 e^{k_2 a}\right)} C_1$$

$$-2ik_1 C_2 = -(k_2 + ik_1) C_3 + (k_2 - ik_1) C_4 = -(k_2 + ik_1) \frac{(k_2 - ik_1) e^{k_2 a} e^{ik_1 a}}{2k_2} C_5 + (k_2 - ik_1) \frac{(k_2 + ik_1) e^{-k_2 a} e^{ik_1 a}}{2k_2} C_5$$

$$-2ik_1 C_2 = \left(e^{-k_2 a} - e^{k_2 a}\right) \frac{(k_2 - ik_1)(k_2 + ik_1)}{2k_2} e^{ik_1 a} C_5$$

$$C_2 = \frac{\left(e^{k_2 a} - e^{-k_2 a}\right)(k_2 - ik_1)(k_2 + ik_1)}{\left((k_2 + ik_1)^2 e^{-k_2 a} - (k_2 - ik_1)^2 e^{k_2 a}\right)} C_1,\ C_3 = \frac{2ik_1 (k_2 - ik_1) e^{k_2 a}}{\left((k_2 + ik_1)^2 e^{-k_2 a} - (k_2 - ik_1)^2 e^{k_2 a}\right)} C_1$$

$$C_4 = \frac{2ik_1 (k_2 + ik_1) e^{-k_2 a}}{\left((k_2 + ik_1)^2 e^{-k_2 a} - (k_2 - ik_1)^2 e^{k_2 a}\right)} C_1$$

Плотность потока вероятности падающей волны $j_x^{ПАД} = -2ik_1 \dfrac{i\hbar}{2m} |C_1|^2$.

Плотность потока вероятности прошедшей волны $j_x^{ПРОШ} = 2ik_1 \dfrac{i\hbar}{2m} |C_5|^2$.

Коэффициент прозрачности барьера

$$D = \frac{\left|\vec{j}^{\,ПРОШ}\right|}{\left|\vec{j}^{\,ПАД}\right|} = \left|\frac{C_5}{C_1}\right|^2 = \left|\frac{4ik_1 k_2 e^{-ik_1 a}}{\left((k_2^2 - k_1^2)\left(e^{-k_2 a} - e^{k_2 a}\right) + 2ik_1 k_2 \left(e^{-k_2 a} + e^{k_2 a}\right)\right)}\right|^2 =$$

$$= \frac{16 k_1^2 k_2^2}{(k_2^2 - k_1^2)^2 \left(e^{-k_2 a} - e^{k_2 a}\right)^2 + 4k_1^2 k_2^2 \left(e^{-k_2 a} + e^{k_2 a}\right)^2}$$

Приближённо можно считать, что $D \approx e^{-2k_2 a} \approx exp\left(-\dfrac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - E)} \cdot a\right)$

Для барьера произвольной формы, заданной в виде функции $U(x)$:

$$D \approx exp\left(-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2m\left(U-E\right)}dx\right)$$

где интеграл берётся по интервалу (x_1, x_2), на котором выполняется неравенство $U>E$.

Определение. Туннельный эффект или туннелирование - это явление преодоления микрочастицей потенциального барьера в случае, когда её полная энергия (остающаяся при туннелировании неизменной) меньше высоты барьера. Туннельный эффект - явление исключительно квантовой природы, невозможное в классической механике.

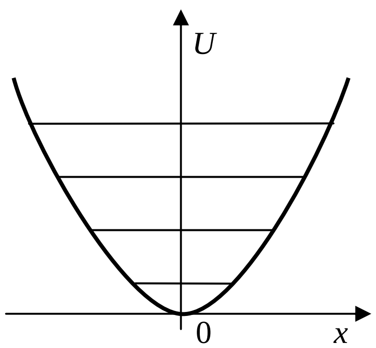
Замечание. В классической механике энергия частицы равна сумме кинетической и потенциальной энергий $E = E_K + U$. В случае если $E < U$ формально получаем, что $E_K < 0$. Следовательно, в квантовой механике нельзя определить энергию частицы как сумму потенциальной и кинетической. Это выражение справедливо только для *средних* значений.

Квантовый гармонический осциллятор.

Квантовый гармонический осциллятор – это квантовый аналог классической задачи об одномерных колебаниях материальной частицы под действием квазиупругой силы вблизи положения равновесия. В этом случае потенциальную энергию можно выразить через смещение от положения равновесия в виде $U = \frac{kx^2}{2}$. Круговая частота колебаний частицы равна $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$, поэтому выражение для энергии примет вид $U = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$.

Квантовый гармонический осциллятор – это одномерная модель колебаний микрочастиц. Эти колебания могут быть вызваны тепловыми движениями или колебаниями под действием внешних электромагнитных волн. В классической механике при колебаниях механическая энергия сохраняется, поэтому в квантовой механике эту задачу рассматриваем как стационарную.

Уравнение Шрёдингера (для стационарного состояния), описывающее квантовый гармонический осциллятор



$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{m\omega^2 x^2}{2}\right)\cdot\psi = 0 .$$

Оказывается, что данное уравнение имеет непрерывные решения только в случае, если энергия частицы выражается в виде

$$E = \left(n + \frac{1}{2}\right)\cdot\hbar\omega .$$

Следовательно, уровни энергии отстоят от друга на одинаковую величину $\hbar\omega$, поэтому энергия осциллятора может изменяться только порциями, кратными $\hbar\omega$. Число n определяет уровни энергии, поэтому называется *главным* квантовым числом.

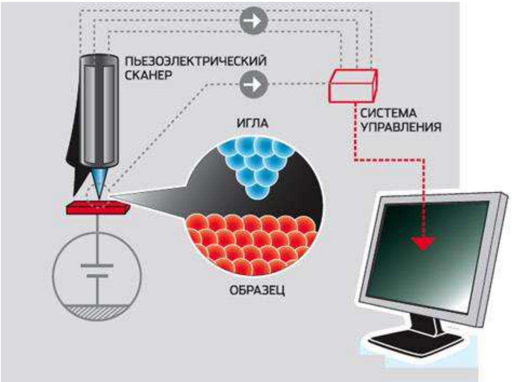
Для квантового осциллятора существует *правило отбора* – энергии меняется так, чтобы главное квантовое число изменялось на единицу $\Delta n = \pm 1$.

Существует минимальное значение энергии $E = \frac{\hbar\omega}{2}$. Меньше этого значения энергия осциллятора принимать не может.

Таким образом, можно сказать, что модель квантового гармонического осциллятора не противоречит гипотезе Планка о дискретности уровней энергии системы и о существовании квантов.

Наличие минимального значения энергии колебаний системы говорит о том, что всю энергию у системы «отобрать» невозможно. Что в свою очередь, не противоречит теореме Нернста о недостижимости абсолютного нуля температур (как состояния с нулевой энергией колебаний).

Сканирующий туннельный микроскоп



Рассматривать отдельные атомы можно с помощью устройства, использующего квантовый эффект туннелирования – сканирующий туннельный микроскоп (СТМ). Точнее, сканирующий туннельный микроскоп не рассматривает, а как бы «ощупывает» исследуемую поверхность. Очень тонкая игла-зонд с острием толщиной в один атом перемещается над поверхностью объекта на расстоянии порядка одного нанометра. При этом согласно законам квантовой механики, электроны преодолевают вакуумный барьер между объектом и иглой – туннелируют, и между зондом и образцом начинает течь ток. Сила этого тока очень сильно зависит от расстояния между концом иглы и поверхностью образца – при изменении зазора на десятые доли нанометра сила тока может возрасти или уменьшиться на порядок. Так что, перемещая зонд вдоль поверхности с помощью пьезоэлементов и отслеживая изменение силы тока, можно исследовать ее рельеф практически «на ощупь».

Создание СТМ стало значительным шагом в освоении наномира. В 1986 году сотрудникам Исследовательского центра компании IBM в Цюрихе Герду Биннигу и Генриху Рореру за это достижение была присуждена Нобелевская премия.

СТМ позволяет увидеть детали поверхности с разрешением в сотые и даже тысячные доли нанометра (соответствует увеличению порядка 100 миллионов раз). На самом деле, это графическое изображение того, как меняется зазор между зондом и поверхностью для поддержания постоянного значения тока. Взаимодействие зонда СТМ с электронными оболочками атомов дает возможность изучить самые мельчайшие подробности, доступные на сегодняшний день.