Лекция 11. Частица в потенциальной яме. Квантовый гармонический осциллятор. Спектр энергий, структура волновых функций. Рассеяние частицы. Потенциальная ступенька и потенциальный барьер. Туннельный эффект

Штыгашев А.А.

Новосибирск, НГТУ

Нестационарное уравнение Шредингера

В классической физике уравнение движения частицы в силовом потенциальном поле записывается в виде второго закона Ньютона

$$m\frac{\partial^2}{\partial t^2}\boldsymbol{r} = -\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}U(\boldsymbol{r}) \tag{1}$$

С начальными условиями $\boldsymbol{r}(0)$ и $\boldsymbol{v}(0)$ при (1) полностью определяет задачу (задача Коши), $U = U(\boldsymbol{r})$ - потенциальная энергия частицы в силовом поле.

Для важного случая одномерного движения второй закон Ньютона имеет вид

$$m\frac{\partial^2}{\partial t^2}x = -\frac{\partial}{\partial x}U(x) \tag{2}$$

с начальными условиями $x(0)$ и $v(0)$ при $t = 0$.

Нестационарное уравнение Шредингера (НУШ)

В квантовой физике уравнение движения должно определять изменение волновой функции $\psi(\boldsymbol{r}, t)$ во времени. Уравнения движения для $\psi(\boldsymbol{r}, t)$ установлены Э. Шредингером в 1926 году

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\boldsymbol{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\boldsymbol{r}, t) + U(\boldsymbol{r}) \psi(\boldsymbol{r}, t) \qquad (3)$$

с начальным условием $\psi(\boldsymbol{r}, 0)$ и краевыми условиями, которые определяют движение частицы на границе физической системы.

Из-за мнимой единицы в НУШ волновая функция может быть комплекснозначной и поэтому ненаблюдаемой.

Наблюдаемы только квантово-механические вероятности $|\psi(\boldsymbol{r}, t)|^2$.

Если потенциальная энергия не зависит от времени и является только функцией координат, то решения уравнения Шредингера можно представить в виде

$$\psi(\boldsymbol{r}, t) = \psi(\boldsymbol{r}) e^{-iEt/\hbar} \tag{4}$$

где E - полная энергия квантовой частицы.

Подставляя в НУШ выражение

$$\psi(\boldsymbol{r}, t) = \psi(\boldsymbol{r})e^{-iEt/\hbar}$$

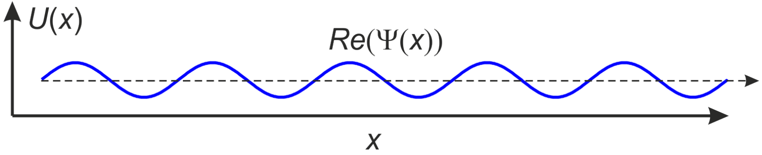
получаем следующее уравнение

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\boldsymbol{r}) + U(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{r}) \tag{5}$$

называемое стационарным уравнением Шредингера (СУШ), справедливое в нерелятивистском приближении.

Пример 1. Свободное одномерное движение частицы.

Пусть ось x направлено вдоль направления движения частицы и $U(x) = 0$

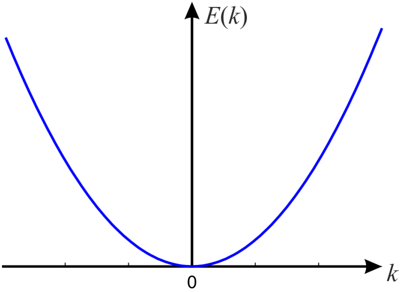


Уравнение Шредингера (УШ) в этом случае

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = E\psi(x) \qquad (6)$$

Решением УШ будет плоская волна вида

$$\psi(x) = Ae^{ikx} \qquad (7)$$



Подставляя $\psi(x)$ в уравнение Шредингера получаем закон дисперсии

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tag{8}$$

Спектр энергий частицы непрерывный и ограниченный снизу.

Полная волновая функция частицы (7) определяет однородную плотность распределения вероятности

$$\rho(x,t) = |\psi(x,t)|^2 = |A|^2 = \text{const} \tag{9}$$

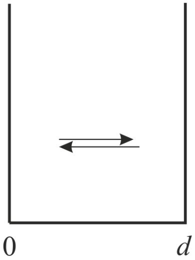
и от времени не зависит.

Формально ВФ равномерно распределена по всему координационному пространству, но тогда ВФ не нормируема

$$\int_V |\psi(x,t)|^2 dV = \int_V |A|^2 dV \to \infty \tag{10}$$

Для задач, в которых частица имеет непрерывный спектр энергий, нельзя найти вероятность нахождения частицы в заданной области пространства

Пример 2. Частица в потенциальной яме с бесконечно высокими потенциальными стенками



Оптико-механическая аналогия - электромагнитная волна в резонаторе с зеркально отражающими стенками.

Рассмотрим финитное одномерное движение частицы в прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими потенциальными стенками.

Уравнение Шредингера для частицы массы в потенциальной яме вида

$$U(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < d, \\ \infty, & x < 0, x > d \end{cases} \tag{11}$$

имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = E\psi(x) \tag{12}$$

Решение уравнения Шредингера есть суперпозиция плоских волн в потенциальной яме

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \tag{13}$$

с краевыми условиями

$$\psi(0) = \psi(d) = 0 \tag{14}$$

Учитывая краевые условия (14) уравнение (13) дает систему относительно амплитуд волновой функции

$$\begin{cases} A + B = 0, \\ Ae^{ikd} + Be^{-ikd} = 0 \end{cases} \tag{15}$$

$$\begin{cases} B = -A, \\ A(e^{ikd} - e^{-ikd}) = 0 \end{cases} \tag{16}$$

Выражение в скобках $e^{ikd} - e^{-ikd}$ дает

$$\sin kd = 0,$$

$$k_n d = n\pi,$$

$$k_n = \frac{n\pi}{d}.$$

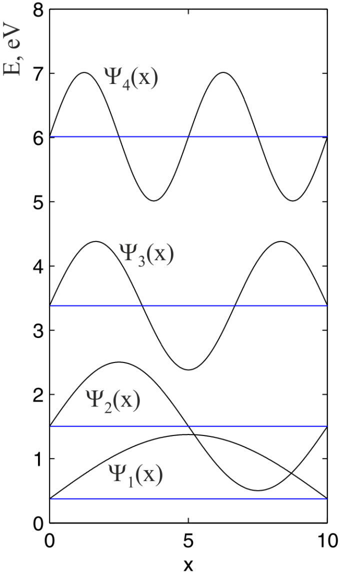
Энергия стационарных состояний E_n равна

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2md^2} \tag{17}$$

Энергия основного состояния

$$E_1 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2md^2} \tag{18}$$

отлична от нуля, так как, если бы частица находилась в покое, то мы бы знали ее состояние, что уже противоречит соотношению неопределенностей.



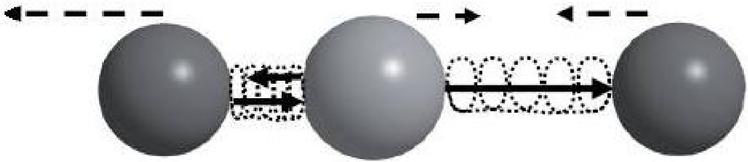
Спектр энергий частицы дискретный, движение частицы финитно, ограничено в области от 0 до d.
Волновая функцию $\psi_n(x) = Ae^{ik_nx} + Be^{-ik_nx}$ n-го стационарного состояния

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{d}} \sin \frac{n\pi}{d} x \qquad (19)$$

Гармонический осциллятор

Гармоническим осциллятором (ГО) в классической физике называет систему – частицу, на которую действует сила пропорциональная отклонению частицы от положения равновесия и направленная к положению равновесия.
ГО называют одномерным, если частица движется вдоль одной прямой.

К гармоническому осциллятору можно свести описание малых колебаний маятника и груза на пружине, колебаний атомов в молекулах и твердых телах, нуклонов в ядрах, а также движения заряда в однородном магнитном поле, изменения напряжения и тока в колебательном контуре и многие другие физические процессы.



В случае ГО потенциальная энергия частицы описывается параболической зависимостью от координаты

$$U(x) = \frac{1}{2}\chi x^2 \tag{20}$$

где

$$\chi = m\omega^2$$

Стационарное уравнение Шредингера одномерного гармонического осциллятора имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\psi(x) = E\psi(x) \tag{21}$$

Введем безразмерные величины:

$$\varepsilon = \frac{2E}{\hbar\omega},$$

$$\Lambda = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

$$z = \frac{x}{\Lambda}$$

Уравнение Шредингера запишется как дифференциальное уравнения вида

$$-\frac{d^2}{dz^2}\psi(z) + (z^2 - \varepsilon)\psi(z) = 0 \tag{22}$$

которое имеет решение при

$$\varepsilon = 2n + 1, \tag{23}$$

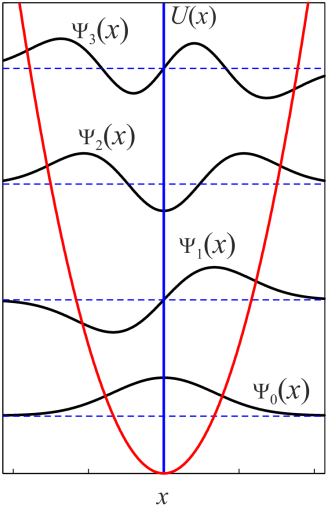
где $n = 0, 1, 2, 3, ...$

В размерных единицах энергия стационарных состояний ГО

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \qquad (24)$$

Принято говорить об уровнях энергии и в этом случаи эти уровни расположены на одинаковом расстоянии друг от друга (эквидистантный спектр).

При $n = 0$ получаем, что $E_0 = \hbar\omega/2$, это означает, что в основном состоянии осциллятор совершает нулевые колебания.



$$
\begin{aligned}
\psi_0(z) &= a_0 \exp(-z^2/2), \qquad (25)\\
\psi_1(z) &= a_1 z \exp(-z^2/2),\\
\psi_2(z) &= a_2(2z^2 - 1) \exp(-z^2/2),\\
\psi_3(z) &= a_3 z(z^2 - 3/2) \exp(-z^2/2),
\end{aligned}
$$

$$a_0 = 1/\sqrt{\Lambda\sqrt{\pi}}$$

$$a_1 = a_0\sqrt{2}$$

$$a_2 = a_0/\sqrt{2}$$

$$a_3 = 2a_0/\sqrt{3}$$

Вероятность найти частицу ГО, находящегося в n-м состоянии, в области $a \leq x \leq b$ есть

$$W(a, b) = \int_a^b |\psi_n(x)|^2 dx$$

Рассеяние частиц

В классической физике коэффициент прохождения описывается ступенчатой функцией

$$T(E) = \begin{cases} 1, & E > \max U(x) \\ 0, & E < \max U(x) \end{cases} \tag{26}$$

Квантовая частица, в отличие от классической, проникает в классически недоступную область пространства.

Рассмотрим распространение квантовой частицы слева направо, тогда волновая функция частицы есть плоская волна вида $\psi(x) = A\exp(ikx)$ (множитель $e^{-i\omega t}$ не выписываем).
Волновое число частицы

$$k(x) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - U(x))} \tag{27}$$

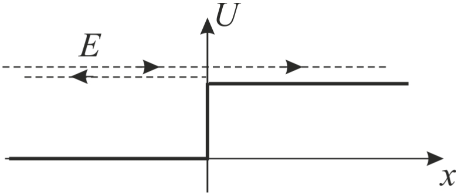
Волновая функция

$$\psi(x) = A\exp(ik(x)x) \tag{28}$$

Потенциальным барьером называется область пространства, где потенциальная энергия частицы больше, чем потенциальная энергия частицы в окружающих областях пространства.

Рассеяние частицы на потенциальном барьере бесконечной ширины

Рассмотрим рассеяние частицы на потенциальном барьере бесконечной ширины



Классическая частица падающая слева на потенциальную ступеньку при $E < U$ отразилась от потенциального барьера, а при $E > U$ продолжила бы движение вправо с меньшей скоростью $v = \sqrt{2(E-U)/m}$.

Оптико-механическая аналогия - электромагнитная волна падающая на зеркально отражающую стенку.

Квантовая частица при $E < U$ отразилась от потенциального барьера, а при $E > U$ с некоторой вероятностью отразилась обратно, что является чисто квантовым эффектом. Найдем эту вероятность.

Волновая функция частицы при $x < 0$, согласно принципу суперпозиции, состоит из падающей и отраженной плоских волн

$$\psi_1(x) = A_1 \exp(ik_1 x) + B_1 \exp(-ik_1 x) \tag{29}$$

а в области $x > 0$ имеется лишь уходящая вправо плоская волна

$$\psi_2(x) = A_2 \exp(ik_2 x) \tag{30}$$

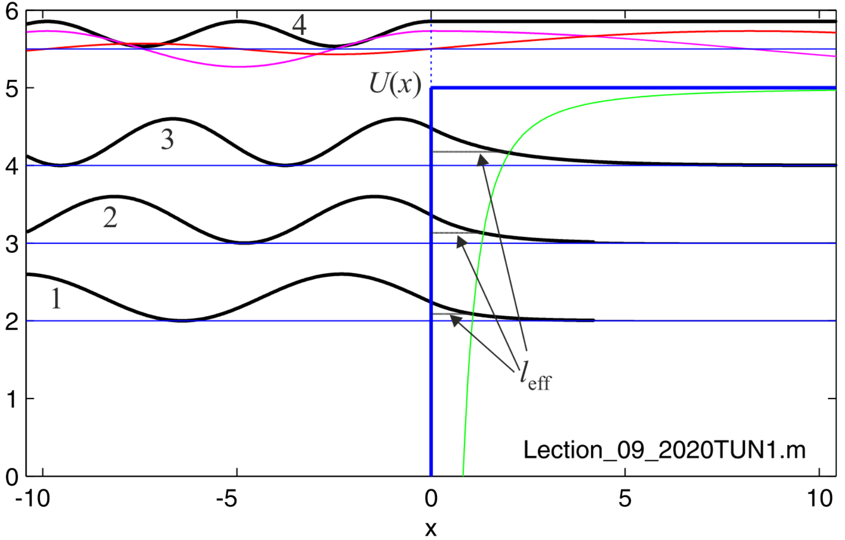
где $B_2 = 0$, $k_1 = \hbar^{-1}\sqrt{2m(E - U_1)}$, $k_2 = \hbar^{-1}\sqrt{2m(E - U_2)}$, $U_1 = 0$.

Волновая функция и её производная по координате должны быть непрерывными на границах раздела, тогда

$$\begin{cases} A_1 + B_1 = A_2, \\ k_1 A_1 - k_1 B_1 = k_2 A_2 \end{cases} \tag{31}$$

Считая A_1 заданным, найдем A_2 и B_1.

$$A_2 = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} A_1, \quad B_1 = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} A_1 \tag{32}$$



Величина l_{eff} называется эффективной глубиной туннелиро

Поток вероятности

$$j = \frac{i\hbar}{2m}\left(\psi\frac{d\psi^*}{dx} - \psi^*\frac{d\psi}{dx}\right) \qquad (33)$$

Определим вероятность отражения как отношение потока вероятности частиц отраженных от потенциального барьера к падающему потоку вероятности

$$R = \left| \frac{j_{B_1}}{j_{A_1}} \right| \tag{34}$$

а вероятность прохождения

$$T = \left| \frac{j_{A_2}}{j_{A_1}} \right| \tag{35}$$

Вычисляя парциальные потоки вероятности:

$$j_{A_1} = \frac{\hbar k_1}{m}|A_1|^2,$$

$$j_{B_1} = -\frac{\hbar k_1}{m}|B_1|^2,$$

$$j_{A_2} = \frac{\hbar k_2}{m}|A_2|^2.$$

Знак «минус» означает, что движение в обратную сторону.

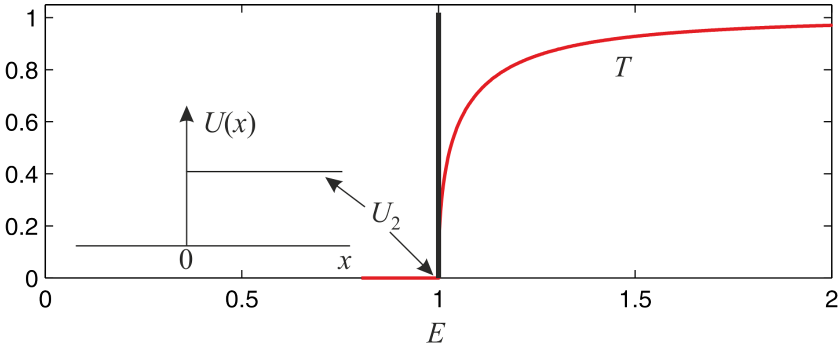
Коэффициент отражения R и прохождения T:

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

$$T = \frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2}$$

Закон сохранения полного потока вероятности

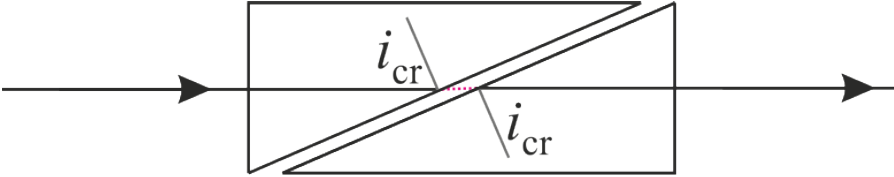
$$R + T = 1 \tag{36}$$



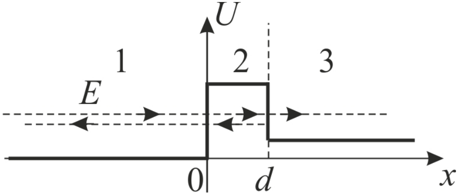
Высота барьера $U_2 \equiv U_0 = 1$ эВ

Туннелирование

Оптико-механическая аналогия - электромагнитная волна падающая на слой диэлектрика под углом полного внутреннего отражения отражающую стенку.



Рассмотрим рассеяние частицы на потенциальном барьере конечной ширины d



Классическая частица падающая слева на потенциальный барьер при $E < U_2$ отразится от потенциального барьера, а при $E > U_2$ продолжит движение вправо с меньшей скоростью $v = \sqrt{2(E - U_2)/m}$ во второй области.

Квантовая частица при $E < U_2$, но $E > U_3$ частично отразиться от потенциального барьера частично проникнет в правую область 3, а при $E > U_2$ с некоторой вероятностью отразилась обратно, что является чисто квантовым эффектом.

Туннелирование частицы это квантовый переход системы (частицы) через область движения, запрещенную классической механикой.

Пример туннельного процесса – прохождение частицы через потенциальный барьер. При этом энергия частицы меньше высоты потенциального барьера, $E = mv^2/2 + U$, если $E < U$, то $mv^2/2 < 0$ и классическая частица отражается от барьера, тогда как квантовая частицы в силу своей волновой природы проникает под барьер.

Волновая функция частицы в левом полупространстве 1

$$\psi_1(x) = A_1 \exp(ik_1 x) + B_1 \exp(-ik_1 x) \tag{37}$$

а в области 2

$$\psi_2(x) = A_2 \exp(ik_2 x) + B_2 \exp(-ik_2 x), \tag{38}$$

а в правом полупространстве 3

$$\psi_3(x) = A_3 \exp(ik_3(x-d)), \tag{39}$$

$$k_1 = \hbar^{-1}\sqrt{2m(E-U_1)}$$

$$k_2 = \hbar^{-1}\sqrt{2m(E-U_2)}$$

$$k_3 = \hbar^{-1}\sqrt{2m(E-U_3)}$$

Волновая функция и её производная по координате должны быть непрерывными на границах раздела, тогда

$$\begin{cases} A_1 + B_1 = A_2 + B_2, \\ ik_1 A_1 - ik_1 B_1 = ik_2 A_2 - ik_2 B_2, \\ A_2 e^{ik_2 d} + B_2 e^{-ik_2 d} = A_3, \\ ik_2 A_2 e^{ik_2 d} - ik_2 B_2 e^{-ik_2 d} = ik_3 A_3. \end{cases} \tag{40}$$

Считая A_1 заданным, можно найти амплитуды волновых функций $B_1,\ B_2,\ B_2,\ A_3$.

1. Вероятность прохождение $U_1 \neq U_3$

- (a) $E > U_2$ надбарьерное прохождение

$$T = \frac{4k_1k_3}{(k_1+k_3)^2 + \left(k_2^2 + \frac{k_1^2k_3^2}{k_2^4} - k_1^2 - k_3^2\right)\sin^2 k_2 d} \qquad (41)$$

- (b) $E < U_2$ подбарьерное туннелирование

$$T = \frac{4k_1k_3}{(k_1+k_3)^2 + \left(k_2^2 + \frac{k_1^2k_3^2}{k_2^4} + k_1^2 + k_3^2\right)\sinh^2 k_2 d} \qquad (42)$$

где $k_2 = \hbar^{-1}\sqrt{2m(U_2 - E)}$

2. Вероятность прохождение $U_1 = U_3$

- (a) $E > U_2$ надбарьерное прохождение

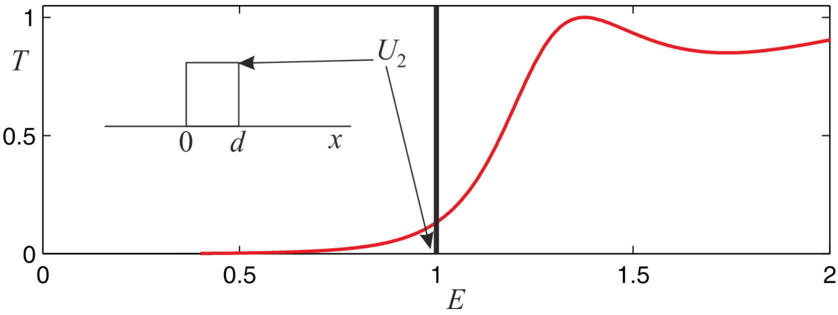
$$T = \frac{1}{1 + \frac{1}{4}\left(\frac{k_2}{k_1} - \frac{k_1}{k_2}\right)^2 \sin^2 k_2 d} \tag{43}$$

- (b) $E < U_2$ подбарьерное туннелирование

$$T = \frac{1}{1 + \frac{1}{4}\left(\frac{k_2}{k_1} + \frac{k_1}{k_2}\right)^2 \sinh^2 k_2 d} \tag{44}$$

где $k_2 = \hbar^{-1}\sqrt{2m(U_2 - E)}$

Коэффициент (вероятность) туннелирования



Высота барьера $U_2 \equiv U_0 = 1$ эВ, толщина барьера $d = 1$ нм.

Квазиклассическое приближение для туннелирования

Квазиклассическое приближение квантовой механики – приближенный метод нахождения волновых функции и уровней энергии системы при условии малости длины волны де Бройля λ частицы по сравнению с характерными размерами изменения потенциала R, т.е. $|\lambda(x)/R| \ll 1$.

Если потенциальная энергия $U(x)$ частицы гладкая функция от координаты, то для оценок вероятности туннелирования удобно использовать следующий подход.

При $k_2 d \gg 1$ $\sinh k_2 d$ есть

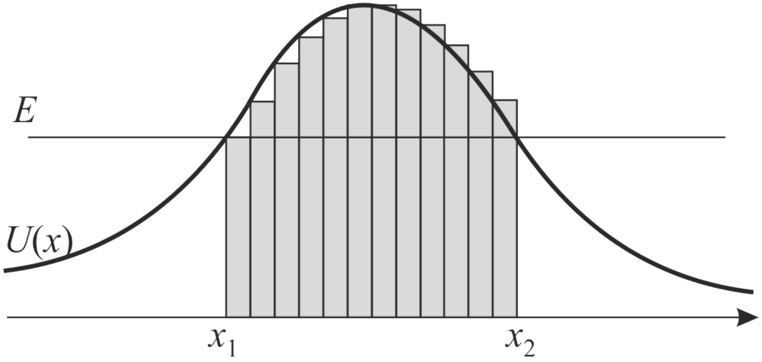
$$\sinh k_2 d = (e^{k_2 d} - e^{-k_2 d})/2 \approx e^{k_2 d}/2$$

тогда

$$T = \frac{1}{1 + \frac{1}{16}\left(\frac{k_2}{k_1} + \frac{k_1}{k_2}\right)^2 e^{2k_2 d}} \approx \frac{16}{\left(\frac{k_2}{k_1} + \frac{k_1}{k_2}\right)^2} e^{-2k_2 d} \equiv T_0 e^{-2k_2 d} \tag{45}$$

где T_0 - предэкспоненциальный фактор.
Эту формулу удобно использовать для качественных оценок.

Пусть частица с энергией E подает на широкий и гладкий потенциальный барьер, тогда область некласичности $E < U(x)$ определена классическими точками поворота $x_1,\ \ x_2$, в которых $p(x_{1,2}) = \hbar k(x_{1,2}) = 0$



Представим потенциальный барьер как совокупности прямоугольных барьеров (слоев) толщины Δx, тогда вероятность туннельного прохождения равна произведению вероятностей туннелирования через слои:

$$T = T_1 T_2 ... T_N = T_{01} T_{02} ... T_{0N} e^{-2k_1 \Delta x - 2k_2 \Delta x - ... - 2k_N \Delta x} \qquad (46)$$

или

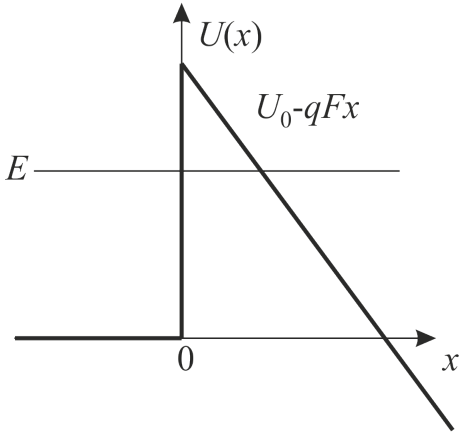
$$T = T_0 e^{-2 \int_{x_1}^{x_2} \hbar^{-1} \sqrt{2m(U(x) - E)} dx} \qquad (47)$$

где $T_0 = T_{01} T_{02} ... T_{0N}$.

Холодная эмиссия электронов из металла

Р. Милликен и Ч. Лоритсен (1929) установили линейную зависимость логарифма плотности тока j от $1/F$, где F - напряженность внешнего электричекого поля.

Электроны в металле находятся в потенциальной яме, потенциальные барьеры которой сформированы на границе раздела «металл-вакуум». Электроны в металле занимают наинизшие уровни энергии такой ямы и не могут покинуть потенциальную яму. Если же вблизи поверхности имеется электрическое поле высокой напряженности F_0 (порядка 10^8 В/м), которое приводит выходу электронов на поверхность металла и дальнейшего ухода с поверхности вдоль силовых линий в вакуум. Это явление называется холодной эмиссией.



С позиции классической физики это явление не понятно, так как электрическое поле из-за электростатической экранировки не проникает в металл, но меняет потенциальную энергию электрона вне металла, в результате чего формируется потенциальный барьер примерно треугольной формы. Таким образом потенциальный барьер со стороны поля становится туннельно прозрачным для электронов.

Приведем результат расчета вероятности холодной эмиссии электронов

$$T = T_0 e^{-I(x)}, \tag{48}$$

где

$$I(x) = \frac{2}{\hbar}\int_0^x \sqrt{2m(U_0 - qFx' - E)}dx' = F_0/F \tag{49}$$

и

$$F_0 = 4\sqrt{2m}(U_0 - E)^{3/2}/3\hbar \approx 10^8 \text{В/м} \tag{50}$$

Так как плотность тока $\sim$ вероятности туннелирования, тогда получаем

$$j = j_0 e^{-F_0/F} \tag{51}$$

ТЕСТ 11

Может ли частица в параболическом потенциале находится в состоянии с энергией равной нулю?
****

ИДЗ (20-30 баллов)

Пользуясь пакетом PyNomo (или аналогичным пакетом) построить номограмму для вычисления эквивалентной емкости двух последовательно соединенных конденсаторов в 1 и 5 мкФ.