

## Глава 10. Барьер и яма конечной глубины

Выше мы познакомились с теми свойствами частиц, которые не наблюдаются в классической механике. К ним относятся: вырождение энергетических уровней в отсутствие внешних полей, дискретный спектр энергии в потенциальной яме и «просачивание» частицы в классически недоступную область потенциального порога.

В этой главе будет продолжено обсуждение чисто квантовых явлений, имеющих отношение к атомной физике. Мы познакомимся с туннельным эффектом — прохождением частицы сквозь потенциальный барьер конечной ширины. Далее убедимся, что в потенциальной яме не всегда есть дискретные уровни энергии, если глубина ямы ограничена. Наконец, в связи с эффектом Рамзауэра будут решены задачи о рассеянии на потенциальном барьере и потенциальной яме.

### 10.1. Потенциальный барьер

Потенциальный барьер, в отличие от рассмотренного в предыдущей главе потенциального порога, имеет конечную ширину. График зависимости  $U(x)$  изображён синим цветом на рис. 10.1.1.

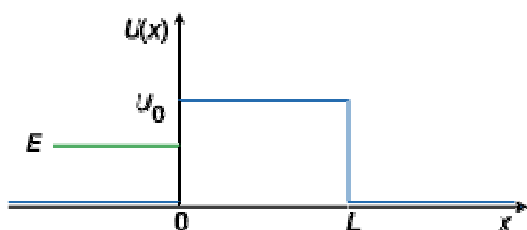


Рис.10.1.1. Прямоугольный потенциальный барьер.

Потенциальная энергия равна своему пороговому значению  $U_0$  внутри промежутка  $[0, L]$ , а снаружи обращается в нуль. Энергия налетающей частицы  $E$  отмечена зелёной линией, как и на рис. 9.4.1.

В предыдущей главе мы установили, что квантовую частицу можно обнаружить и в области, запрещённой для классического движения. Хотя вероятность обнаружения экспоненциально уменьшается по мере удаления от порога, тем не менее, в точке  $x = L$  она имеет некоторое отличное от нуля значение. Следовательно, частица может проникнуть сквозь потенциальный барьер. Такое явление называют «туннельным эффектом».

Здесь мы напишем основную формулу туннельного эффекта в её простейшем варианте, исходя из решения задачи о потенциальном пороге. А именно, будет рассмотрен случай сильного затухания проходящей волны на правой границе барьера:

$$(1.2) \quad W(L) \ll 1.$$

Если это условие выполнено, то амплитуда отражённой волны невелика, и в первом приближении её можно не учитывать. Тогда ответ получается сразу. В области  $x > L$  частица снова движется свободно, следовательно, вероятность прохождения барьера в принятом приближении можно оценить как

$$W(L) \approx \frac{|\psi_2(L)|^2}{|\psi_2(0)|^2} = e^{-2k_2L}$$

(обозначения соответствуют разделу 9.4 предыдущей главы). Подставляя сюда выражение для  $k_2$  из (9.4.7), получим окончательно

$$(1.3) \quad W(L) \approx \exp \left[ -\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} L \right].$$

Условие (1.2) выполняется, если показатель экспоненты велик по абсолютной величине.

Формулу (1.3) можно обобщить на случай потенциального барьера произвольной формы. Если функция  $U(x)$  меняется от точки к точке, как это показано на рис. 10.1.2, то

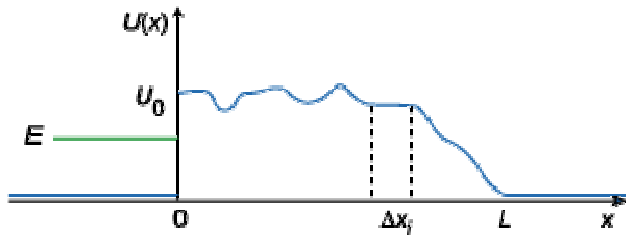


Рис.10.1.2. Потенциальный барьер произвольной формы.

поступаем следующим образом. Интервал  $0 \leq x \leq L$  разбиваем на участки длиной  $\Delta x_i$ , в пределах каждого из которых потенциальную энергию  $U_i$  можно считать постоянной. Вероятность  $W_i$  того, что частица пройдет элементарный участок, получается из (1.3), заменой  $U_0$  на  $U_i$  и  $L$  на  $\Delta x_i$ :

$$W_i = \exp \left[ -\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U_i - E)} \cdot \Delta x_i \right].$$

В силу независимости отдельных элементарных событий, вероятность прохождения через весь барьер равна произведению

$$W(L) = \prod_i W_i = \exp \left[ -\frac{2}{\hbar} \sum_i \sqrt{2m(U_i - E)} \cdot \Delta x_i \right].$$

В пределе разбиваем весь интервал на бесконечно малые промежутки  $dx$  и заменяем сумму интегралом:

$$(1.4) \quad W(L) = \exp \left[ -\frac{2}{\hbar} \int_0^L \sqrt{2m(U(x) - E)} dx \right].$$

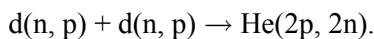
Перейдём к изложению физических явлений, в которых имеет место туннельный эффект.

## Примеры туннельного эффекта

Самыми известными проявлениями туннельного эффекта являются ядерные реакции и холодная эмиссия металлов.

### 1. Синтез ядер.

Впервые задачу о слиянии двух ядер решил Гамов. Примером такой реакции является слияние двух ядер дейтерия в  $\alpha$ -частицу:



Реакция синтеза — экзотермическая. График потенциальной энергии взаимодействия ядер схематически приведён на рис. 10.1.3 синим цветом.

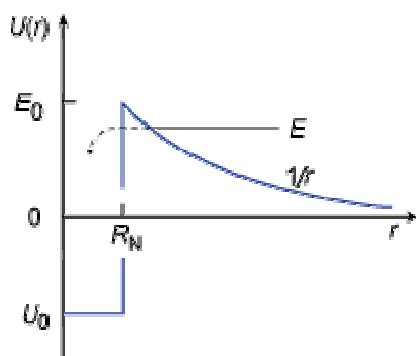


Рис. 10.1.3. Энергия взаимодействия ядер.

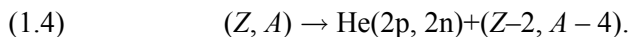
Внутри ядра радиуса  $R_N$  находится глубокая потенциальная яма, а снаружи расположен барьер переменного профиля, обусловленный кулоновским отталкиванием:

$$U(r) = \begin{cases} U_0 < 0 & r < R_N \\ \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} & r > R_N \end{cases}$$

В точке  $r = R_N$  потенциал терпит разрыв. Высота  $E_0$  порога составляет около 100 кэВ. Именно такую энергию должны иметь ядра дейтерия в классической механике, чтобы преодолеть барьер и образовать  $\alpha$ -частицу. В действительности имеет место туннельный эффект, и в ядро способны проникнуть частицы с меньшей энергией. Расчёты показывают, что термоядерные реакции могут эффективно протекать при температуре всего 10 кэВ.

## 2 Распад ядра.

Примером процесса, обратного синтезу ядер, может служить  $\alpha$ -распад:



Здесь  $A$  — массовое число химического элемента (суммарное число протонов и нейтронов в ядре), а  $Z$  — число протонов. Реакция (1.4) заключается в проникновении  $\alpha$ -частицы сквозь потенциальный барьер из ядра в область действия кулоновских сил.

## 3 Холодная эмиссия металлов.

Энергетические уровни электронов в металле ограничены сверху так называемой энергией Ферми  $E_F$ . Электроны не покидают металл, так как находятся перед потенциальным барьером  $U_0$ , обладающим практически бесконечной протяжённостью. Этот барьер на правом чертеже рис.10.1.4 нарисован синей линией. Зелёным цветом помечена энергия Ферми, а чёрные линии изображают уровни энергии.

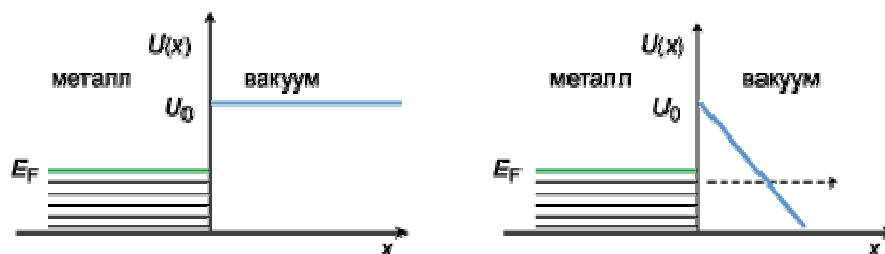


Рис. 10.1.4. Влияние электрического поля на форму потенциального барьера.

В электрическом поле с напряжённостью  $\mathcal{E}$  потенциальная энергия  $U(x)$  линейно зависит от координаты  $x$ , отсчитываемой от поверхности проводника:

$$U = U_0 - e\mathcal{E}x.$$

На правом рисунке зависимость  $U(x)$  обозначена синим цветом. Эффективная толщина барьера становится конечной, и, как следствие, с поверхности металла начинает выходить поток электронов.

## Аналогии из классической механики

Товарный поезд на рис.10.1.5 преодолевает сортировочную горку. Точечный объект был бы

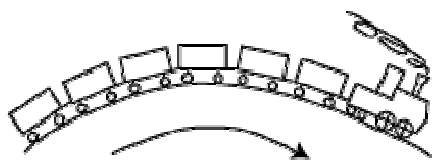


Рис. 10.1.5. Протяжённое тело преодолевает возвышенность.

вынужден развить большую скорость, так как он весь сразу должен пересечь вершину. Но локомотив въезжает сначала сам, потом первый вагон, затем — второй и так далее. Таким образом, поезд «перетекает» через горку по частям, как гусеница. Решение нестационарного уравнения Шредингера показывает, что эта аналогия частично соответствует картине преодоления барьера волновым пакетом, представляющим частицу. Первоначальный пакет разбивается на более мелкие, часть из них проходит через потенциальный барьер, а остальные — отражаются.

## 10.2. Потенциальная яма конечной глубины

Потенциальная яма прямоугольной формы схематически изображена на рис.10.2.1.

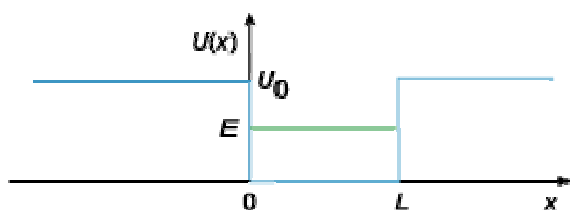


Рис. 10.2.1. Потенциальная яма конечной глубины.

Зависимость  $U(x)$  выражается функцией

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

Метод решения аналогичен применённому в предыдущих задачах, однако расчёты в данном случае более громоздки. Отличие волновой функции и энергетических уровней от тех, которые получаются в задаче о бесконечно глубокой потенциальной яме, мы получим с помощью качественных рассуждений. Для этого мы сначала уточним некоторые свойства одномерного уравнения Шредингера. Переписав его в форме

$$\frac{\psi''}{\psi} = \frac{2m}{\hbar^2}(U - E),$$

убеждаемся, что знак  $\psi(x)$  совпадает со знаком  $\psi''(x)$  при  $U > E$  и что их знаки противоположны при  $U < E$ . В первом случае функция имеет положительную кривизну, во втором — отрицательную. Рассмотрим сначала случай  $U > E$ . Ему соответствуют четыре разных варианта соотношения между знаками функции, её первой и второй производных:

№	1	2	3	4
$\psi$	+		—	
$\psi''$	+		—	
$\psi'$	+	—	+	—

Все они могут быть описаны экспонентой

$$\psi \sim be^{kx}$$

с действительным параметром  $k$ , положительным или отрицательным. Как видно на рис.10.2.2, первый и четвёртый варианты не годятся для физических приложений, так как они описывают

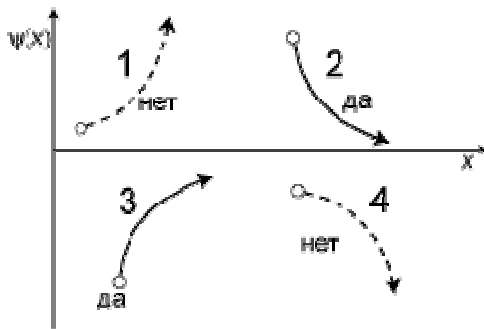


Рис.10.2.2. Кривые с положительной кривизной:  $U > E$ .

функции с бесконечно возрастающим модулем при увеличении  $x$ .

Выясним поведение волновой функции при  $E > U$ . На рис.10.2.3 приведены все варианты кривых с отрицательной кривизной.

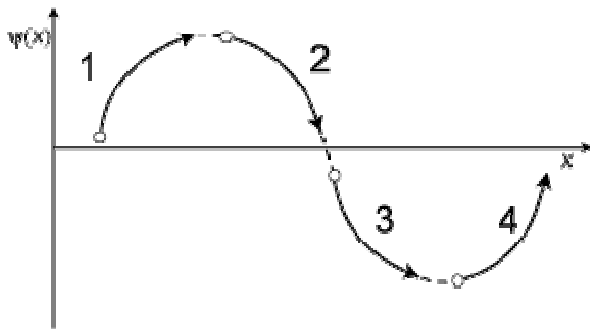


Рис.10.2.3. Кривые с отрицательной кривизной:  $U < E$ .

Они же перечислены в следующей таблице:

№	1	2	3	4
$\psi$	+	—	—	—
$\psi''$	—	—	+	+
$\psi'$	+	—	—	+

Теперь для описания всех кривых подходит функция

$$\psi \sim \cos(kx + \varphi).$$

Таким образом, при условии  $E > U$  реализуются осциллирующие решения, если же  $E < U$ , то волновая функция экспоненциально затухает. Учёт граничных условий — непрерывность волновой функции вместе с её первой производной — всё это соответствует одновременной подгонке амплитуды  $b$  в экспоненциальной форме и фазы  $\varphi$  в представлении гармонической функции.

Вернёмся к рассматриваемой задаче. Построим качественно решение для случая  $E < U_0$ . В центре,  $0 < x < L$ , решение описывается гармонической функцией, а по краям оно экспоненциально затухает. График волновой функции схематически изображён на рис.10.2.4. Меняя фазу осцилляций и амплитуды экспонент, мы сшиваем

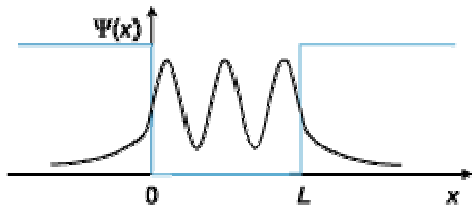


Рис. 10.2.4. "Сшивание" волновой функции.

все три участка области изменения волновой функции. Все эти операции аналогичны тем, что были выполнены в предыдущей главе, когда мы решали задачу о частице, налетающей на потенциальный порог. Рис. 10.2.4 аналогичен рис. 9.4.2. Сшивка возможна лишь в том случае, если внутри ямы укладывается целое число полувольт. Таким образом, снова получаем квантование энергетических уровней.

### Особенности решений для ямы конечной глубины

Яма конечной глубины объединяет в себе свойства бесконечно глубокой ямы и потенциального барьера. Внутри ямы имеет место осциллирующее решение, а при  $x < 0$  и  $x > L$  волновая функция «просачивается» наружу. Выше мы получили, что величина просачивания растёт с уменьшением модуля разности  $|U_0 - E|$ . Просачивание вызывает растягивание узлов и, как следствие — снижение уровней энергии. Чем выше лежит уровень, тем дальше за пределы отрезка  $(0, L)$  уходит волновая функция. Это означает, что с увеличением квантового числа  $n$  в большей мере возрастает расстояние между узлами, а вместе с ним — и длина волны. Напомним, что энергия обратно пропорциональна квадрату дебройлевской длины волны:

$$E = \frac{p^2}{2m} \propto k^2 \propto \frac{1}{\lambda^2}.$$

Следовательно, с ростом  $n$  уровни опускаются всё глубже по сравнению с их положением в яме с бесконечно высокими стенками. На рис. 10.2.5 изображены уровни энергии  $E$  и графики волновой функции в сравнении с бесконечно глубокой ямой. Слева повторена левая часть рис. 9.3.2. Смещение первого уровня невелико, для третьего оно — самое большое.

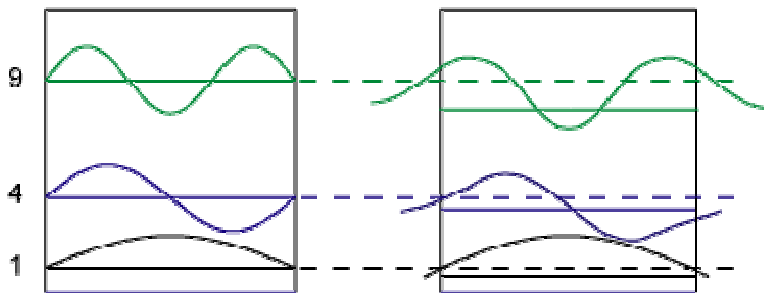


Рис. 10.2.5. Сравнение ямы конечной глубины  $U_0$  (справа) с бесконечно глубокой потенциальной ямой (слева).

Ещё одно важное свойство ямы конечной глубины заключается в том, что у неё вообще могут отсутствовать связанные состояния. Локализуем частицу в области  $\Delta x \sim L$ . Минимально возможная энергия  $E_{\min}$  связанного состояния получается из соотношения неопределенностей, где точность локализации частицы полагаем равной ширине ямы  $L$ :

$$\Delta p \geq \hbar / L.$$

Отсюда следует

$$E_{\min} \sim \frac{(\Delta p)^2}{m} \sim \frac{\hbar^2}{mL^2}.$$

Связанные состояния существуют, если

$$E_{\min} < U_0$$

то есть при выполнении неравенства

$$U_0 L^2 \geq \frac{\hbar^2}{m}$$

Положение уровня определяется произведением  $U_0 L^2$ . Связанные состояния имеются либо у достаточно широкой ямы, либо в достаточно сильном поле. Если при фиксированной ширине  $L$  мы будем уменьшать  $U_0$ , то дискретный уровень постепенно поднимается вверх, ближе к границе ямы, и наступит момент, когда уровень «всплывёт» в континуум. То же самое произойдёт, если в заданном поле  $U_0$  будем уменьшать размер ямы  $L$ .

### 10.3. Рассеяние на потенциальном пороге

Задача ставится следующим образом. Частица, двигаясь слева направо с энергией  $E$ , налетает на потенциальный барьер  $U_0 < E$ , расположенный на рис. 10.3.1 в точке  $x = 0$ . График функции  $U(x)$ , как и прежде, обозначим синим цветом, а энергию частицы — зелёным. В классической механике частица преодолевает порог, испытывая некоторое торможение на участке  $(0, L)$ . Обсудим поведение квантовой частицы. Стрелками помечены

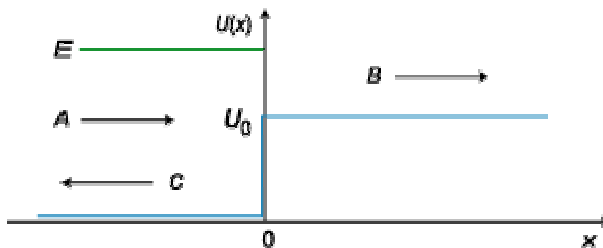


Рис. 10.3.1. Частица налетает на потенциальный порог.

амплитуда падающей волны ( $A$ ), а также прошедшей ( $B$ ) и отражённой ( $C$ ) волн. Аналогичная задача уже была решена в четвёртом разделе предыдущей главы, но для случая, когда энергия частицы меньше высоты порога. Там мы убедились, что существует вероятность проникновения частицы внутрь порога. Здесь же мы увидим, что частица может испытать отражение, несмотря на то, что её энергия превышает высоту барьера.

Приступим к решению задачи. По аналогии с разделом 9.4 введём следующие обозначения:

$$(3.1a) \quad k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

для области слева от барьера и

$$(3.1b) \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar}$$

справа от барьера. Очевидно,  $k_1 > k_2$ . Запишем уравнение Шредингера для каждой из областей:

$$\begin{aligned}\psi_1'' + k_1^2 \psi_1 &= 0 \\ \psi_2'' + k_2^2 \psi_2 &= 0\end{aligned}$$

Слева от барьера волновая функция равна сумме падающей и отражённой волн,

$$(3.2a) \quad \psi_1 = A \cdot \exp(ik_1 x) + C \cdot \exp(-ik_1 x),$$

в то время как справа от разрыва распространяется только прошедшая волна:

$$(3.2b) \quad \psi_2 = B \cdot \exp(ik_2 x).$$

Граничные условия

$$\begin{aligned}\psi_1(0) &= \psi_2(0), \\ \psi_1'(0) &= \psi_2'(0)\end{aligned}$$

были выведены в разделе 9.4 предыдущей главы. Напомним, что они отражают отсутствие процессов рождения и гибели частиц, а также ограниченность потенциала. С их помощью мы можем выразить два неизвестных параметра в (3.2) через третий, например, так:

$$(3.3) \quad \begin{aligned}A &= \frac{B}{2} \left( 1 + \frac{k_2}{k_1} \right), \\ C &= \frac{B}{2} \left( 1 - \frac{k_2}{k_1} \right).\end{aligned}$$

Коэффициент отражения  $R$  равен отношению квадратов амплитуд падающей и отражённой волн:

$$(3.4) \quad R \equiv \frac{|C|^2}{|A|^2} = \left( \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2 = \left( \frac{1 - \sqrt{1 - \frac{U_0}{E}}}{1 + \sqrt{1 - \frac{U_0}{E}}} \right)^2.$$

Отсюда видно, что вероятность отражения отлична от нуля при любом значении энергии налетающей частицы. В этом проявляются её квантовые свойства. Правда, при  $E \sim U_0$  отражением можно пренебречь, что соответствует классическому случаю  $E > U_0$ .

Аналогия с классической механикой наблюдается также при максимально возможном понижении энергии частицы. Если величина  $E$  практически не отличается от высоты порога:  $E - U_0 \sim E$ , то коэффициент отражения становится близок к единице. В классической механике этот результат соответствует отражению частицы от барьера, если  $E < U_0$ .



Рассмотрим теперь иной вариант задачи: частица «падает из-за порога». На рис.10.3.2

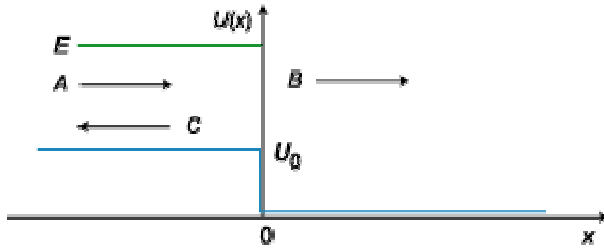


Рис. 10.3.2. Частица "слетает" с потенциального порога.

области слева и справа от разрыва поменялись местами по сравнению с рис.10.3.1. Поэтому можно воспользоваться решением предыдущей задачи, выполнив замену  $k_1 \Leftrightarrow k_2$ . Тогда вместо (3.3) получим:

$$(3.5) \quad \begin{aligned} A &= \frac{B}{2} \left( 1 + \frac{k_1}{k_2} \right), \\ C &= \frac{B}{2} \left( 1 - \frac{k_1}{k_2} \right). \end{aligned}$$

Коэффициент отражения предыдущем случае. Однако, имеется и существенное различие. Легко убедиться, что знаки  $C$  и  $A$  в (3.3) одинаковы, а в (3.5) — противоположны. Таким образом, падающая и отражённая волны находятся в противофазе.

В классической физике имеется аналог этого явления. В третьем разделе пятой главы приведена «оптико–механическая аналогия»: импульс частицы  $p$  или волновое число  $k$  являются аналогами показателя преломления  $n$ , причём  $n$  является растущей функцией  $k$ . Из оптики известно, что отражение от оптически более плотной среды (3.5) происходит без изменения фазы, а при отражении от менее плотной среды (3.3) фаза меняется на  $\pi$ . Итак, в первом случае (падение на порог) происходит потеря полуволны.

Сбой фазы имеет важные последствия для рассеяния на потенциальной яме. В самом деле, потенциальную яму можно составить из двух порогов. Если между двумя разрывами укладывается целое число полуволн, то две отражённые волны компенсируют друг друга, и отражённая волна пропадает. Так как дебройлевская длина волны связана с импульсом частицы, то «провал» отражения имеет место для частиц определённых энергий. Рассмотрим рассеяние на потенциальной яме подробнее.

#### 10.4. Рассеяние на потенциальной яме

Задача предыдущего раздела позволит нам понять интересные квантовые эффекты, имеющие место при рассеянии на потенциальной яме. На рис. 10.4.1 присутствуют амплитуды уже пяти волн:

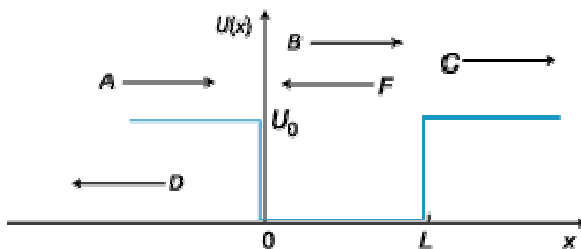


Рис. 10.4.1. Рассеяние на потенциальной яме.

$A$  — падающей,  
 $B$  — прошедшей через первый барьер,

$D$  — отражённой от первого барьера,  
 $F$  — отражённой от второго барьера,  
 $C$  — прошедшей через второй барьер.

Амплитуда  $F$  с точностью до потерь на отрезке  $(0, L)$  равна  $D$  по модулю и противоположна по знаку. Если на ширине ямы укладывается целое число полуволн, то в области  $x < 0$  произойдёт взаимное погашение волн. Это явление известно в классической физике как эффект просветления оптики.

Рассматриваемая задача имеет строгое решение. Бросаем на потенциальную яму волну с амплитудой  $A$  и записываем выражения для волновой функции на трёх участках:

$$\begin{aligned}\psi_1 &= A \exp(ik_2 x) + D \exp(-ik_2 x) & x < 0, \\ \psi_2 &= B \exp(ik_1 x) + F \exp(-ik_1 x) & 0 < x < L, \\ \psi_3 &= C \exp(ik_2 x) & x > L.\end{aligned}$$

Параметры  $k_1$  и  $k_2$  определены в (3.1). Граничные условия для волновой функции на двух границах

$$\begin{aligned}\psi_1(0) &= \psi_2(0), & \psi'_1(0) &= \psi'_2(0), \\ \psi_2(L) &= \psi_3(L), & \psi'_2(L) &= \psi'_3(L)\end{aligned}$$

приводят к системе из четырёх линейных уравнений с пятью неизвестными. Все искомые амплитуды можно выразить через одну из них, например через  $A$ . Опуская простые, но длинные вычисления, приведём окончательное выражение для коэффициента отражения:

$$R = \frac{|D|^2}{|A|^2} = \frac{\sin^2(k_1 L)}{4 \frac{E}{U} \left( \frac{E}{U} - 1 \right) + \sin^2(k_1 L)}.$$

Из этого соотношения вытекает, что коэффициент отражения обращается в нуль не только в уже известном нам случае больших энергий налетающей частицы. Отражение отсутствует также, когда ширина ямы равна целому числу полуволн и волны, отражённые от двух краёв ямы, гасят друг друга:

$$R = 0 \begin{cases} E \gg U_0 \\ L = n \frac{\lambda_1}{2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \end{cases}$$

Полученный результат объясняет так называемый эффект Рамзауэра, наблюдаемый при упругом рассеянии электронов на атомах благородных газов: аргона, криптона и ксенона. Он заключается в том, что вероятность рассеяния резко уменьшается при некоторых значениях энергии электрона, как это схематически показано на рис. 10.4.2.

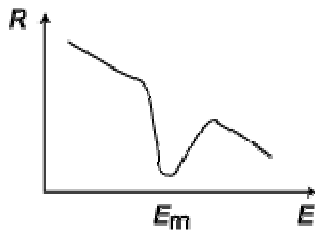


Рис.10.4.2. Эффект Рамзауэра.

Наличие «провала» можно объяснить следующим образом. Атом инертного газа представляет собой компактное образование (заполненные подболочки). Так что потенциал взаимодействия в грубом приближении можно заменить потенциальной ямой с резко очерченными краями. При определённых значениях энергии электрона  $E_m$  на отрезке длиной  $L$  может уложиться целое число полуволн. Две волны, отражённые от краёв ямы, гасятся, и электрон пролетает свободно, не испытывая взаимодействия.