

Лекция 8 Простейшие одномерные задачи квантовой механики: прямоугольный потенциальный барьер

1 Прохождение частицы через одномерный потенциальный барьер: постановка задачи.

2 Определение коэффициентов отражения и прозрачности потенциального барьера при $E > U_0$ и при $E < U_0$

3 Прозрачность прямоугольного барьера конечной ширины

4 Прозрачность барьера произвольной формы.

5 Туннельный эффект в реальных физических системах

Рассмотрим решение квантово-механической задачи о состояниях микрочастицы, проходящей через одномерный потенциальный барьер.

Потенциальный барьер – ограниченная в пространстве область, в которой потенциальная энергия частицы, движущейся в силовом поле, больше, чем по обе стороны от нее (рисунок 8.1). Потенциальный барьер соответствует силам отталкивания.

В классической механике прохождение частицы через потенциальный барьер возможно только в том случае, если ее полная энергия E не меньше высоты U_0 потенциального барьера. Если же частица обладает энергией меньшей, чем высота потенциального барьера, то она не только не пройдет сквозь барьер, но даже не проникнет в область барьера. Таким образом, потенциальный барьер в классическом представлении является как бы непроницаемой стенкой для частиц с энергией, меньшей высоты потенциального барьера.

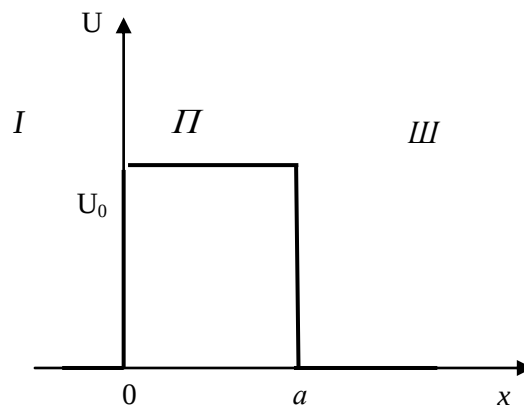


Рисунок 8.1 – Потенциальный барьер
конечной ширины

Иначе обстоит дело в квантовой механике. Преодоление микрочастицей потенциального барьера в случае, когда ее полная энергия меньше высоты

барьера, называется *туннельным эффектом*, или *туннелированием*. Аналогом этого эффекта в оптике является прохождение световой волны сквозь слой вещества, показатель преломления которого меньше, чем у граничащих с ним сред, в условиях, когда по законам геометрической оптики это невозможно (так называемое нарушенное полное внутреннее отражение¹).

Рассмотрим простейший случай одномерного движения частицы с массой m в области пространства с потенциальным барьером прямоугольной формы (рисунок 8.1).

В областях I и III потенциальная энергия равна нулю:

$$U(-\infty < x \leq 0) = U(a \leq x < \infty) = 0; .$$

В области II ($0 < x < a$) потенциальная энергия $U = U_0 > 0$.

Именно эта область является потенциальным барьером.

Степень влияния барьера на движение частицы характеризуется коэффициентами отражения R и прохождения D , которые имеют смысл вероятности того, что частица, движущаяся к потенциальному барьеру слева (рисунок 8.1), останется в области пространства I , (изменяя направление своего движения на противоположное) – коэффициент R , или перейдет в область III – коэффициент D .

Рассмотрим случай, когда $E < U_0$, и найдем для частицы коэффициенты отражения R и прохождения D . Для этого необходимо решить одномерное стационарное уравнение Шрёдингера и найти функции состояния Ψ_I , Ψ_{II} и Ψ_{III} в каждой из областей пространства I , II и III .

Уравнение Шрёдингера для областей I , II , III соответственно имеет вид:

$$\begin{aligned} \frac{d^2\Psi_I}{dx^2} + \kappa_1^2\Psi_I &= 0; & \kappa_1 &= \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \equiv \kappa; \\ \frac{d^2\Psi_{II}}{dx^2} - \kappa_2^2\Psi_{II} &= 0; & \kappa_2 &= \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}; \\ \frac{d^2\Psi_{III}}{dx^2} + \kappa_3^2\Psi_{III} &= 0; & \kappa_3 &= \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \equiv \kappa. \end{aligned} \quad (8.1)$$

Решение уравнения для области I имеет вид суперпозиции падающей волны де Бройля с амплитудой A_1 и отраженной волны с амплитудой B_1 :

$$\Psi_I = A_1 e^{i\kappa x} + B_1 e^{-i\kappa x}. \quad (8.2)$$

¹ Золотарёв, В.М. Нарушенное полное внутреннее отражение / В.М. Золотарёв. - Физический энциклопедический словарь. – М.: Советская энциклопедия, 1984. – С. 446.

Действительно, первое слагаемое в (8.2) соответствует координатной части волны де Бройля (4.1), распространяющейся по направлению оси Ox , а второе – координатной части волны де Бройля, распространяющейся в противоположном направлении.

В области III , в соответствии с постановкой задачи (то есть в отсутствие частиц, падающих на потенциальный барьер справа), решение содержит только прошедшую волну, распространяющуюся в положительном направлении оси x :

$$\Psi_{III} = A_3 e^{i\kappa(x-a)}. \quad (8.3)$$

В области II общее решение уравнения Шрёдингера имеет вид

$$\Psi_{II} = A_2 e^{-\kappa_2 x} + B_2 e^{\kappa_2 x}. \quad (8.4)$$

Из условий непрерывности волновой функции и ее производной по координате x в точках $x=0$ и $x=a$, найдем следующие соотношения между коэффициентами, содержащимися в выражениях (8.2) – (8.4):

$$A_1 + B_1 = A_2 + B_2; \quad (8.5)$$

$$A_2 e^{-\kappa_2 a} + B_2 e^{\kappa_2 a} = A_3; \quad (8.6)$$

$$i\kappa(A_1 - B_1) = \kappa_2(B_2 - A_2); \quad (8.7)$$

$$\kappa_2(B_2 e^{\kappa_2 a} - A_2 e^{-\kappa_2 a}) = i\kappa A_3. \quad (8.8)$$

Из (8.6) и (8.8) следует, что

$$A_2 = \frac{1-in}{2} e^{\kappa_2 a} A_3; \quad (8.9)$$

$$B_2 = \frac{1+in}{2} e^{-\kappa_2 a} A_3. \quad (8.10)$$

В выражениях (8.9) и (8.10) использовано обозначение

$$n = \frac{\kappa}{\kappa_2} = \left(\frac{E}{U_0 - E} \right)^{1/2}.$$

Решение системы уравнений (8.5) – (8.8) упрощается в случае, когда параметр $\kappa_2 a = \frac{a\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}$ имеет числовое значение не менее нескольких единиц. Тогда $e^{\kappa_2 a} \gg 1$, а $e^{-\kappa_2 a} \ll 1$ (например, уже при $\kappa_2 a = 3$ имеем $e^{\kappa_2 a} \approx 20$, $e^{-\kappa_2 a} \approx 0,05$). В этом случае с учетом соотношения $|1-in| = |1+in|$, из (8.9) – (8.10) следует, неравенство

$|A_2| \gg |B_2|$, и в дальнейших выкладках можно считать $B_2 = 0$.

Решая систему уравнений (8.5) – (8.8) при $B_2 = 0$, найдем

$$A_1 = \frac{(1-in)(i+n)}{2n} e^{\kappa_2 a} A_3; \quad (8.11)$$

$$B_1 = \frac{(1-in)(n-i)}{2n} e^{\kappa_2 a} A_3. \quad (8.12)$$

Таким образом, коэффициенты A_1 и B_1 оказались выраженными через неизвестный коэффициент A_3 . Однако это не является препятствием для нахождения коэффициентов R и D . Обоснуем это.

Коэффициент отражения R , по определению, равен отношению плотности потока $j_{отр}$ частиц, отраженных от барьера, к плотности потока j_0 частиц, движущихся к барьеру:

$$R = j_{отр} / j_0. \quad (8.13)$$

Соответственно коэффициент прохождения равен

$$D = j_{пр} / j_0, \quad (8.14)$$

где $j_{пр}$ плотность потока частиц, прошедших сквозь барьер.

Плотность потока – величина, определяемая числом частиц, проходящих за единицу времени через поперечное сечение единичной площади. При квантовомеханическом описании потока частиц с постоянным импульсом, плотность потока пропорциональна произведению квадрата модуля амплитуды волновой функции, сопоставляемой частице, и модуля импульса частицы. В рассматриваемом случае модули импульсов падающих, прошедших и отраженных частиц одинаковы. Поэтому коэффициент отражения

$$R = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2} \quad (8.15)$$

а коэффициент прохождения

$$D = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2}. \quad (8.16)$$

Таким образом, из уравнений (8.11) и (8.12) нам необходимо найти не коэффициенты A_1 и B_1 , а только отношения этих величин к коэффициенту A_3 , что легко выполнимо.

Решая систему уравнений (8.11) и (8.12), получим:

$$D = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} = \frac{16n^2}{(1+n^2)^2} \exp(-2\kappa_2 a) = \frac{16n^2}{(1+n^2)^2} \exp\left\{-\frac{a\sqrt{8m(U_0 - E)}}{\hbar}\right\}. \quad (8.17)$$

Отметим, что в соответствии с допущениями, сделанными при выводе

выражения (8.17), оно является приближенным, и может применяться только при выполнении условия $\exp\left\{-\frac{a\sqrt{8m(U_0 - E)}}{\hbar}\right\} \ll 1$.

Множитель $\frac{16n^2}{(1+n^2)^2}$, содержащийся в выражении (8.17), в широком интервале значений n , – величина порядка единицы. Поэтому можно считать, что величина D приближенно определяется экспоненциальной функцией:

$$D \approx \exp\left\{-\frac{a\sqrt{8m(U_0 - E)}}{\hbar}\right\} \quad (8.18)$$

При значении параметра $\frac{a\sqrt{8m(U_0 - E)}}{\hbar}$ порядка нескольких единиц коэффициент прохождения имеет значение, при котором возможно наблюдение туннельного эффекта. Нетрудно убедиться, что такие значения достигаются только в области микроскопических явлений и соответственно туннельный эффект можно обнаружить только для микрочастиц.

В частности, для электрона ($m = 9,1 \cdot 10^{-31}$ кг) при разности энергий $U_0 - E = 1$ эВ $= 1,6 \cdot 10^{-19}$ Дж, и при $a = 0,3$ нм (толщина 2-3 атомных слоев) параметр $\frac{a\sqrt{8m(U_0 - E)}}{\hbar} \approx 3$, а коэффициент прохождения $D \approx 0,05$ и

туннельный эффект экспериментально наблюдаем. Таким образом, при $E < U_0$, в противоположность выводам классической механики, *микрочастицы могут проходить через барьер*.

В то же время для весьма малых частиц, имеющих макроскопические массу, размеры и энергию коэффициент прохождения практически равен нулю. Например, для пылинки массой $m = 10^{-8}$ г, «пытающейся» преодолеть барьер шириной 0,1 мкм (в тысячу раз меньше толщины волоса) при разности энергий $U_0 - E = 10^{-19}$ Дж (то есть энергии, необходимой для поднятия этой пылинки на высоту 0,1 мкм) коэффициент прохождения $D \approx \exp(-3 \cdot 10^{12})$.

Проводя решение задачи об определении коэффициентов прохождения и отражения микрочастиц при условии $E > U_0$ (то есть «над барьером») также получаются результаты, противоречащие выводам классического описания. В соответствии с классической механикой частицы с энергией большей U_0 не должны отражаться от барьера: $R = 0$, $D = 1$ и барьер

полностью прозрачен. В квантовой механике даже для надбарьерного прохождения, как правило, $R > 0$, $D < 1$, и некоторая доля частиц отражается от барьера так же, как частично отражаются световые волны на границе двух сред. Как можно показать, при больших энергиях частиц ($E \gg U_0$) результаты квантовой механики согласуются с результатами классической механики (выполняется принцип соответствия).

В обеих рассмотренных ситуациях (при $E < U_0$ и при $E > U_0$) имеет место равенство $R + D = 1$, что соответствует выполнению закона сохранения числа частиц в рассматриваемых процессах.

Если потенциальный барьер имеет произвольную форму (рисунок 8.2),

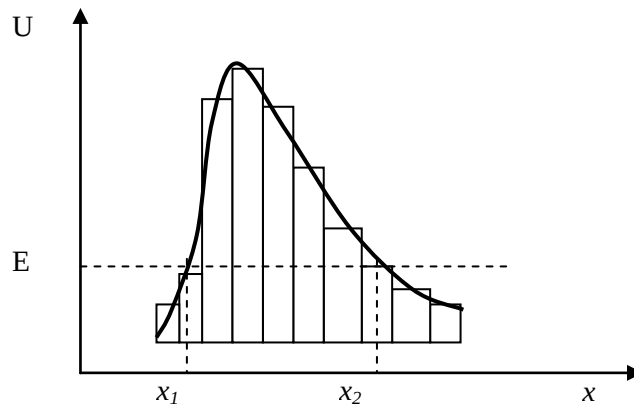


Рисунок 8.2 – Потенциальный барьер произвольной формы

то его можно представить как последовательность прямоугольных потенциальных барьеров. Коэффициент прохождения барьера в этом случае приблизительно равен произведению коэффициентов прохождения через каждый из прямоугольных барьеров, которыми он моделируется. Тогда, при использовании приближенного выражения (8.18) для коэффициента прозрачности потенциального барьера $U(x)$ произвольной формы получим:

$$D = D_0 \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m[U(x) - E]} dx \right\}. \quad (8.19)$$

Описанные в данном разделе особенности поведения частиц связаны с их корпускулярно-волновой природой. Как было показано, туннельный эффект существен только для систем, имеющих микроскопические размеры и массы. Чем уже потенциальный барьер и чем меньше разность $U_0 - E$, тем больше вероятность прохождения частицы через барьер.

Сопоставляя значения коэффициентов R и D , вычисленные в рамках квантовой механики, с результатами их экспериментального определения, можно сделать выводы о правильности теоретической модели,

используемой для описания движения микрочастицы при наличии потенциального барьера.

Примером проявления туннельного эффекта в атомной физике является автоионизация атома.

Автоионизацией (ионизацией полем) называется процесс ионизации атомов и молекул газа в сильных электрических полях.

Связанный электрон в атоме можно представить находящимся в потенциальной яме (рисунок 8.3).

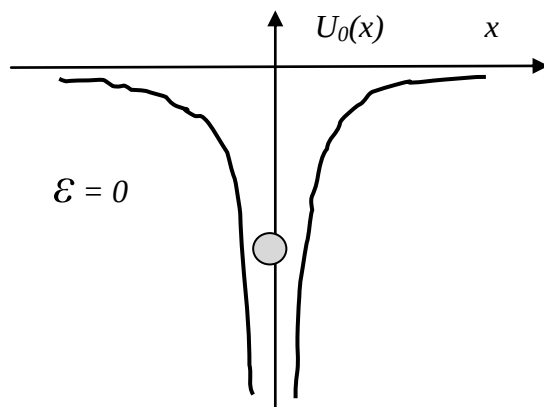


Рисунок 8.3 – Схематическое изображение потенциального поля $U_0(x)$, в котором движется электрон в отсутствие внешнего электрического поля

При включении электрического поля напряженностью $\mathcal{E}$ к потенциальной энергии электрона $U_0(x)$ добавляется потенциальная энергия $e\mathcal{E}x$, где e – абсолютная величина заряда электрона. Вследствие этого потенциальная яма становится асимметричной (рисунок 8.4) – с одной ее стороны образуется потенциальный барьер конечной ширины, сквозь который электрон может «просочиться», то есть может иметь место туннельный эффект и будет возможна ионизация атома.

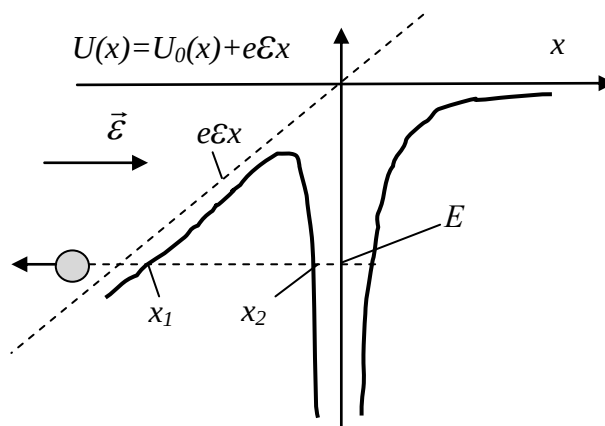


Рисунок 8.4 – Схематическое изображение асимметричной потенциальной ямы $U(x) = U_0(x) + e\mathcal{E}x$, в которой движется электрон, имеющий полную энергию E

В соответствии с (8.19) вероятность $W(E)$ туннелирования электрона сквозь потенциальный барьер определяется по формуле

$$W(E) = \exp \left\{ -\frac{4\pi}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m[U(x) - E]} dx \right\}$$

где $U(x) = U_0(x) + e\mathcal{E}x$ и E – соответственно потенциальная и полная энергия электрона. Вероятность туннелирования $W(E)$ резко увеличивается при увеличении напряженности поля $\mathcal{E}$ и при повышении энергии E электрона в атоме. Например, вероятность автоионизации атома водорода из основного состояния достигает заметной величины только при $\mathcal{E} \sim 10^8$ В/см, а из возбужденных состояний – уже при $\mathcal{E} \sim 10^6$ В/см.

Особенно многочисленны проявления туннельного эффекта в физике твердого тела. Туннельным эффектом объясняется холодная эмиссия электронов из металла в условиях, когда вблизи его поверхности создано электрическое поле напряженностью порядка 10^6 В/см.

Электроны удерживаются внутри металла силами притяжения, и для удаления электрона из металла необходимо совершить определенную работу. Это означает, что потенциальная энергия электрона вне металла больше, чем внутри него, причем на границе металл – вакуум потенциальная энергия резко возрастает. При действии сильного внешнего электрического поля электроны покидают поверхность металла. В классической физике объяснить это явление не удастся: электрическое поле в металл не проникает и изменяет потенциальную энергию только вне металла (штриховая линия на рисунке 8.5).

Чтобы покинуть металл, электроны должны преодолеть потенциальный барьер. Так как их энергия E_e меньше высоты барьера U_0 , то, в соответствии с представлениями классической физики, электроны не могут выйти за пределы поверхности. При квантовомеханическом описании в соответствии с (8.19) коэффициент прохождения электронов через барьер определяется интегралом

$$I = \frac{2}{\hbar} \int_0^{x_2} \sqrt{2m[U(x) - E_e]} dx$$

(здесь $U(x) = U_0 - e\mathcal{E}x$, где $\mathcal{E}$ – напряженность электрического поля, $U(x_2) = E_e$). Значение этого интеграла равно

$$I = \frac{4\sqrt{2m}}{3e\hbar} (U_0 - E_e)^{3/2} = \frac{\varepsilon_0}{\varepsilon}, \quad (8.20)$$

где $\varepsilon_0 = \frac{4\sqrt{2m}}{3e\hbar} (U_0 - E_e)^{3/2} \approx 10^8$ В/м. Так как ток эмиссии прямо пропорционален коэффициенту прохождения барьера, то в соответствии с формулами (8.19) – (8.20) зависимость плотности тока эмиссии от напряженности электрического поля ε имеет вид:

$$j = j_0 \exp\left(-\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon}\right).$$

Такая зависимость хорошо подтверждается в экспериментах.

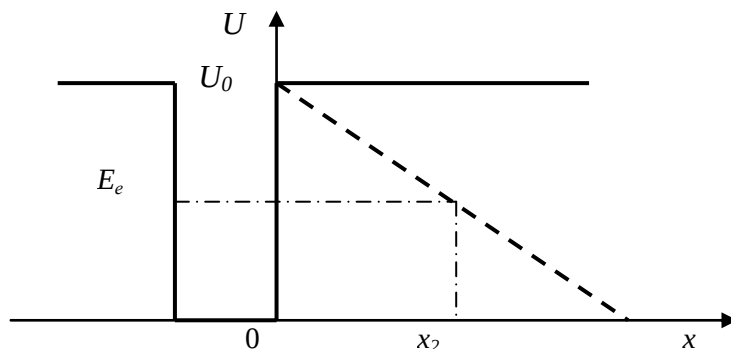


Рисунок 8.5 – К объяснению холодной эмиссии электронов

Кроме холодной, или автоэлектронной, эмиссии, на основе туннельного эффекта в физике твердого тела объясняют также явления в контактном слое на границе двух полупроводников, эффект Джозефсона² и т.д.

На основе туннельного эффекта объясняются такие явления ядерной физики и физики элементарных частиц как альфа-распад радиоактивных ядер, протекание термоядерных реакций и целый ряд эффектов в других разделах физики.

[Задачи по теме лекции 8](#)

[Программа для решения уравнения Шрёдингера для прямоугольного потенциального барьера](#)

² Эффект Джозефсона состоит в протекании сверхпроводящего тока через тонкий слой диэлектрика, разделяющий два сверхпроводника и возникновение при этом электромагнитных колебаний определенной частоты. Эффект предсказан английским физиком Б. Джозефсоном на основе теории сверхпроводимости в 1962 году и обнаружен экспериментально в 1963 году. В 1973 году Б. Джозефсону присуждена Нобелевская премия.