5. ПОТЕНЦИАЛЬНАЯ ЯМА И ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ БАРЬЕР

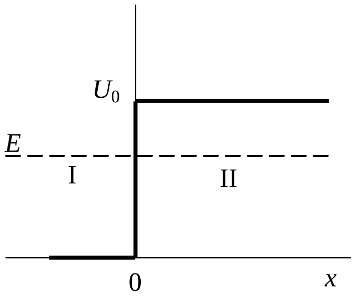

Рис.5

Решение уравнения Шредингера для частицы в прямоугольной бесконечно глубокой потенциальной яме (рис.4) шириной L дает для энергии лишь дискретные значения

$$E_n = \frac{n^2\hbar^2\pi^2}{2mL^2},$$

где число n нумерует возможные значения энергии, n = 1, 2, 3,…–целое число. При этом волновая функция

$$\psi_n(x) = \sqrt{2/L}\,\sin(n\pi x/L). \quad (5.1)$$

Расстояние между уровнями с номерами n и n + 1 зависит от n:

$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = \hbar^2\pi^2(2n+1)/(2mL^2).$$

Рассмотрим движение частицы с энергией E в поле потенциального барьера бесконечной ширины (рис.5) и высоты U_0. Если $E < U_0$, то в стационарном режиме отражается вся энергия падающей волны, однако под ступенькой ($x > 0$) волновая функция не равна нулю, а экспоненциально затухает с ростом координаты x. Это соответствует наличию коэффициента преломления

$$n = \lambda_1/\lambda_2 = k_2/k_1,$$

где $k_1^2 = 2mE/\hbar^2$ и $k_2^2 = 2m(E - U_0)/\hbar^2$ – волновые числа, соответствующие движению частицы в областях I и II.

Если $U_0 < E$, то частица частично отражается, а частично проходит через барьер. Поэтому можно ввести коэффициенты отражения (R) и прохождения (D). Коэффициент отражения барьера

$$R = [(k_1 - k_2)/(k_1 + k_2)]^2. \quad (5.2)$$

Коэффициент прохождения барьера равен отношению доли прошедшей волны к падающей:

$$D = 4k_1k_2/(k_1 + k_2)^2.$$

Для коэффициентов отражения и прохождения выполняется соотношение $R + D = 1$. В классическом случае (для $E > U_0$) всегда $D = 1$ и $R = 0$.

Если квантовая частица массой m, двигаясь в области I с энергией E, встречает на своем пути потенциальный барьер (рис.6) шириной L и высотой U_0, то она может отразиться и остаться в области I. Однако существует конечная вероятность того, что она окажется в области III, даже если $E < U_0$. Этот эффект называется туннельным эффектом. В области II происходит затухание волновой функции.

Вероятность прохождения частицы через барьер – коэффициент прозрачности потенциального барьера

$$D = D_0 \exp\left[-\frac{2L}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - E)}\right],$$

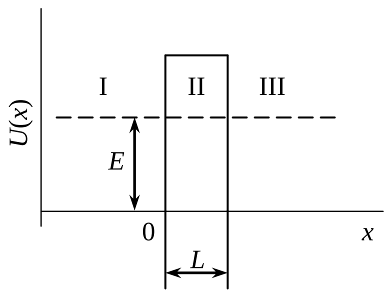

Рис.6

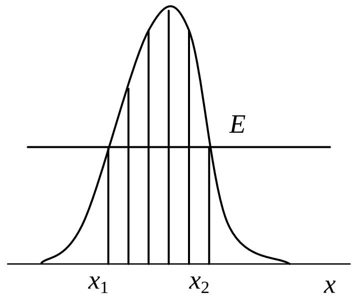

Рис.7

где m и E – масса и энергия частицы, падающей на барьер; U_0 – высота барьера; L – ширина барьера; D_0 – коэффициент, определяемый природой барьера и обычно слабо отличающийся от единицы, $D_0 \approx 1$.

Если барьер имеет произвольную форму (рис.7), то его можно разбить на ряд прямоугольных барьеров. Суммарное действие таких барьеров приводит к формуле

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

Пределы интегрирования определяют из условия $U(x) = E$.

Пример 1. Электрон находится в потенциальной яме шириной L. Найти вероятность того, что электрон, находящийся в возбужденном состоянии ($n = 2$), будет обнаружен в средней трети ямы.

Решение. Вероятность найти частицу в интервале $x_1 < x < x_2$

$$W = \int_{x_1}^{x_2} |\psi_n(x)|^2\,dx,$$

где $\psi_n(x)$ – нормированная собственная волновая функция, для прямоугольной ямы вычисляется по формуле (5.2).

Учитывая, что $n = 2$, получим $W = (2/L)\int_{x_1}^{x_2}\sin^2(2\pi x/L)dx$. По условию $x_1 = L/3$ и $x_2 = 2L/3$. Проведем замену $\sin^2(2\pi x/L) = \, = [1-\cos(4\pi x/L)]/2$ и разобьем интеграл на два:

$$W = \frac{2}{L}\int_{L/3}^{2L/3}\sin^2\left(\frac{2\pi x}{L}\right)dx = \frac{1}{L}\left\{\int_{L/3}^{2L/3}dx - \int_{L/3}^{2L/3}\cos\left(\frac{4\pi x}{L}\right)dx\right\} =$$

$$= \frac{1}{3} - \frac{1}{4\pi}\left(\sin\frac{8\pi}{3} - \sin\frac{4\pi}{3}\right).$$

После вычислений получим $W = 0{,}195$.

Пример 2. Частица находится в бесконечно глубокой одномерной потенциальной яме шириной L на втором энергетическом уровне. В каких точках ямы плотность вероятности обнаружения частицы совпадает с классической плотностью вероятности?

Решение. Волновая функция, описывающая состояние частицы в бесконечно глубокой одномерной потенциальной яме шириной L, имеет вид $\psi_n(x) = \sqrt{2/L}\,\sin(\pi n x/L)$, где n – номер энергетического уровня, $n = 1, 2, \ldots$; x – координата частицы в яме, $0 \le x \le L$. Согласно физическому смыслу волновой функции, плотность вероятности w обнаружения частицы в точке с координатой x равна $|\psi|^2$. Если частица находится на втором энергетическом уровне ($n = 2$), то $w_2 = (2/L)\sin^2(2\pi x/L)$. Следуя принципу соответствия Бора, выражение для классической плотности вероятности получим при $n \to \infty$ в виде $w_\infty = 1/L$. Приравнивая, получим $\sin^2(2\pi x/L) = 1/2$. Решение этого уравнения $x = (k \pm 1/4)L/2$, где k принимает значения 0, ±1, ±2, … В пределах ямы таких точек четыре, их координаты $L/8$; $3L/8$; $5L/8$; $7L/8$.

Пример 3. Электрон с энергией E = 4,9 эВ движется в положительном направлении оси x и падает на потенциальный барьер высотой U_0 = 5 эВ и шириной L. При какой ширине барьера вероятность W прохождения электрона через барьер будет равна 0,2?

Решение. Вероятность прохождения W частицы через барьер по смыслу есть его коэффициент прозрачности D. Поэтому $W = D \approx \exp\left[-(2L/\hbar)\sqrt{2m_e(U_0 - E)}\right]$. Для удобства вычислений логарифмируем: $\ln W = -(2L/\hbar)\sqrt{2m_e(U_0 - E)}$. Поменяем знаки правой и левой частей и найдем

$$L = \frac{\hbar \ln(1/W)}{2\sqrt{2m_e(U_0 - E)}} = 4{,}95 \cdot 10^{-10} \text{ м.}$$

Пример 4. Поток электронов, каждый из которых имеет энергию E = 100 эВ, падает на барьер бесконечной ширины высотой $U_0 < E$. Определить высоту потенциального барьера U_0, если известно, что 4 % падающих на барьер электронов отражаются.

Решение. Коэффициент отражения барьера $R = [(k_1 - k_2)/(k_1 + k_2)]^2$. Так как координата электрона точно не известна, то в соответствии с принципом неопределенностей Гейзенберга точно известен импульс электрона и соответственно его кинетическая энергия. В левой области $k_1 = (1/\hbar)\sqrt{2m_e E}$, в правой области кинетическая энергия равна $E - U_0$ и $k_2 = (1/\hbar)\sqrt{2m_e(E - U_0)}$. Подставив эти данные в выражение (5.2) и разделив на $\sqrt{2m_e E}$, получим

$$R = \left[1 - \sqrt{1 - U_0/E}\right]^2 / \left[1 + \sqrt{1 + U_0/E}\right]^2.$$

После преобразований запишем $\sqrt{1 - U_0/E} = (1 - \sqrt{R})/(1 + \sqrt{R})$ и вычислим $U_0 = \left[1 - \left(1 - \sqrt{R}/1 + \sqrt{R}\right)^2\right]E$ = 55,6 эВ.

Задачи.

1. Альфа-частица находится в бесконечно глубокой одномерной потенциальной яме. Определить ширину ямы, если минимальная энергия частицы 6 МэВ.
2. Электрон находится в бесконечно глубокой одномерной потенциальной яме шириной 0,1 нм. Вычислить длину волны излучения при переходе электрона со второго энергетического уровня на первый.
3. Протон находится в бесконечно глубокой одномерной потенциальной яме шириной 0,01 пм. Найти длину волны излучения при переходе протона с третьего энергетического уровня на второй.
4. Атом водорода находится в бесконечно глубокой одномерной потенциальной яме шириной 0,1 м. Вычислить разность энергий соседних уровней, соответствующих средней энергии теплового движения атома при температуре 300 К.
5. Частица находится в бесконечно глубокой одномерной потенциальной яме шириной L в основном состоянии. В каких точках ямы плотность вероятности обнаружения частицы совпадает с классической плотностью вероятности?
6. Частица находится в бесконечно глубокой одномерной потенциальной яме шириной L в основном состоянии. Определить отношение плотности вероятности обнаружения частицы в центре ямы к классической плотности вероятности.
7. Частица находится в бесконечно глубокой одномерной потенциальной яме шириной L в первом возбужденном состоянии. В каких точках ямы плотность вероятности обнаружения частицы максимальна, а в каких минимальна?
8. Вычислить среднее значение импульса в основном состоянии электрона в одномерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками.
9. Рассчитать среднее значение квадрата импульса электрона в основном состоянии в одномерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками.
10. Частица находится в бесконечно глубокой одномерной потенциальной яме шириной L на втором энергетическом уровне. Определить вероятность обнаружения частицы в пределах от 0 до L/3.

11. Частица находится в бесконечно глубокой одномерной потенциальной яме шириной L в основном состоянии. Найти отношение вероятностей нахождения частицы в пределах от 0 до $L/4$ для первого и второго энергетических уровней.

12. Частица находится в бесконечно глубокой одномерной потенциальной яме шириной L в основном состоянии. Найти отношение вероятностей нахождения частицы в пределах от 0 до $L/3$ и от $L/3$ до $2L/3$.

13. Оценить разность ΔE_n двух соседних уровней энергии при $n >> 1$ для молекулы газа, находящегося в сосуде. Масса молекулы $m = 10^{-26}$ кг, ширина сосуда $L = 10$ см (считать сосуд бесконечно глубокой потенциальной ямой). Сравнить ΔE_n со средней кинетической энергией молекул при комнатной температуре 300 К.

14. Оценить разность ΔE_n двух соседних уровней энергии при $n >> 1$ для электрона, локализованного в атоме с линейными размерами $L \approx 10^{-10}$ м (атом считать бесконечно глубокой потенциальной ямой).

15. Для электрона с энергией $E = 1$ эВ оценить эффективную глубину его проникновения под барьер высоты $U_0 = 5$ эВ.

16. Прямоугольный потенциальный барьер имеет ширину $L = 0{,}1$ нм. Рассчитать разность энергий $U_0 - E$ (в электрон-вольтах), при которой вероятность прохождения электрона сквозь барьер равна 0,5.

17. Протон с энергией 5 эВ движется вдоль оси x, встречая на своем пути прямоугольный потенциальный барьер высотой $U_0 = 10$ эВ и шириной $L = 0{,}1$ нм. Определить вероятность прохождения протоном этого барьера. Во сколько раз следует сузить барьер, чтобы вероятность прохождения его протоном была такой же, как для электрона в тех же условиях.

18. Прямоугольный потенциальный барьер имеет ширину $L = 0{,}1$ нм. Для электрона разность $U_0 - E = 5$ эВ. Во сколько раз изменится коэффициент прозрачности D потенциального барьера, если разность $U_0 - E$ вырастет в 4 раза?

19. Частица с энергией $E = 10$ эВ движется вдоль оси x, встречая на своем пути бесконечно широкий прямоугольный потенциальный барьер высотой $U_0 = 5$ эВ. Найти коэффициент преломления n на границе потенциального барьера.

20. Электрон с длиной волны де Бройля $\lambda_1 = 100$ пм, двигаясь вдоль оси x, встречает на своем пути бесконечно широкий прямоугольный потенциальный барьер высотой $U_0 = 100$ эВ. Определить длину волны де Бройля после прохождения барьера.

21. Частица с энергией $E = 50$ эВ, двигаясь в положительном направлении оси x, встречает на своем пути бесконечно широкий прямоугольный потенциальный барьер высотой $U_0 = 20$ эВ. Какова вероятность отражения частицы от этого барьера?

22. Частица массой $m = 10^{-19}$ кг, двигаясь вдоль оси x со скоростью $v = 20$ м/с, встречает на своем пути бесконечно широкий прямоугольный потенциальный барьер высотой $U_0 = 100$ эВ. Вычислить коэффициент отражения R на границе потенциального барьера.

23. Электрон с энергией E движется в положительном направлении оси x, встречая на своем пути барьер, ширина которого L и высота U_0. Найти вероятность прохождения, если барьер имеет форму, показанную на рис.8.

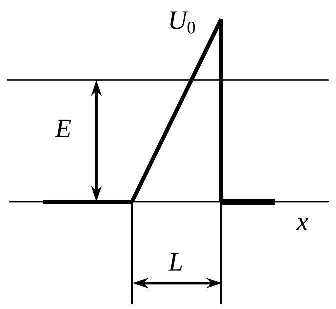

Рис.8

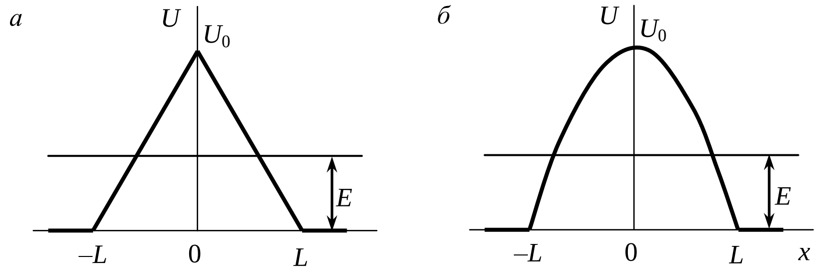

Рис.9

24. Найти вероятность прохождения протона с энергией E сквозь потенциальный барьер, показанный на рис.9, *а*.

25. Какова вероятность прохождения частицы с массой m и энергией E сквозь потенциальный барьер (рис.9, *б*), где $U(x) = U_0(1 - x^2/L^2)$?