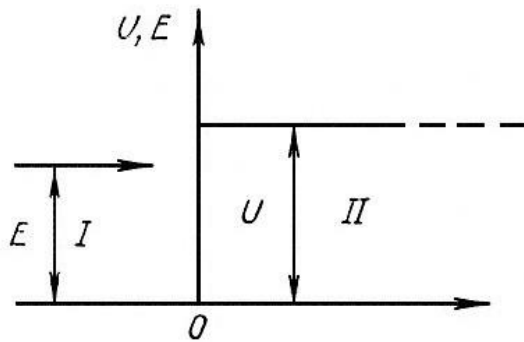


## ЛЕКЦИЯ 4

### ЕДНОМЕРНИ ПОТЕНЦИАЛНИ БАРИЕРИ И ЯМИ С ПРАВОЪГЪЛНА ФОРМА

#### 1. Потенциална бариера с безкрайна ширина

Разглеждаме случай на едномерно движение на свободна частица с маса  $m$  и енергия  $E$ , когато на пътя ѝ се намира правоъгълна потенциална бариера с безкрайна ширина и височина  $U$  (фиг. 5.1):



фиг. 5.1

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

Тъй като задачата е стационарна ( $U$  не зависи от времето), удобно е да решим стационарното уравнение на Шрьодингер за двете области на фиг.5.1 (за свободна частица при

$x < 0$  (област I) и за движение на частица в потенциално поле  $U$  при  $x > 0$  (област II), т.е.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi_I(x)}{dx^2} = E \Psi_I(x), \quad x < 0, \quad (5,1)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi_{II}(x)}{dx^2} + U \Psi_{II}(x) = E \Psi_{II}(x), \quad x \geq 0. \quad (5,2)$$

Въвеждаме означенията

$$k_I = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad k_{II} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-U)}. \quad (5,3)$$

Уравненията (5,1) и (5,2) добиват вида

$$\frac{d^2 \Psi_I(x)}{dx^2} + k_I^2 \Psi_I(x) = 0, \quad x < 0, \quad (5,4)$$

$$\frac{d^2 \Psi_{II}(x)}{dx^2} + k_{II}^2 \Psi_{II}(x) = 0, \quad x \geq 0. \quad (5,5)$$

Решенията на тези уравнения са

$$\Psi_I(x) = Ae^{ik_I x} + Be^{-ik_I x}, \quad x < 0, \quad (5,6)$$

$$\Psi_{II}(x) = Ce^{ik_{II} x}, \quad x \geq 0, \quad (5,7)$$

където  $A$ ,  $B$  и  $C$  са константни амплитуди, като амплитудата  $A$  на падащата вълна се счита дадена. Членовете  $Ae^{ik_I x}$  и  $Be^{-ik_I x}$  описват съответно падащата и отразената вълна в област  $I$ , а  $Ce^{ik_{II} x}$  - преминалата вълна в област  $II$ .

Прилагайки граничните условия

$$\Psi_I(x)|_{x=0} = \Psi_{II}(x)|_{x=0}, \quad (5,8)$$

$$\left. \frac{d\Psi_I(x)}{dx} \right|_{x=0} = \left. \frac{d\Psi_{II}(x)}{dx} \right|_{x=0}, \quad (5,9)$$

получаваме системата

$$A + B = C, \quad (5,10)$$

$$k_I(A - B) = k_{II}C, \quad (5,11)$$

от която намираме връзката между коефициентите:

$$B = \frac{k_I - k_{II}}{k_I + k_{II}} A, \quad C = \frac{2k_I}{k_I + k_{II}} A. \quad (5,12)$$

В израза за плътността на потока на вероятността (вж. (3,16))

$$j = \frac{i\hbar}{2m} \left( \Psi \frac{d\Psi^*}{dx} - \Psi^* \frac{d\Psi}{dx} \right) \quad (5,13)$$

като заместим  $\Psi$  с функцията, описваща падащата вълна  $Ae^{ik_I x}$ , получаваме

$$j_o = \frac{\hbar k_I}{m} |A|^2. \quad (5,14)$$

По аналогичен начин, за плътността на потока на вероятността за отразената и преминалата вълни, съответно, намираме:

$$j_R = \frac{\hbar k_I}{m} |B|^2, \quad (5,15)$$

$$j_D = \frac{\hbar k_{II}}{m} |C|^2. \quad (5,16)$$

Отношението

$$R = \frac{j_R}{j_o} = \frac{|B|^2}{|A|^2}. \quad (5,17)$$

се нарича **коэффициент на отражение**, а

$$D = \frac{j_D}{j_o} = \frac{k_{II} |C|^2}{k_I |A|^2} \quad (5,18)$$

– **коэффициент на прозрачност**.

Величините  $R$  и  $D$  се интерпретират като вероятности, съответно, за отражение на частицата от потенциалната бариера и преминаването ѝ през нея. Чрез непосредствено заместване от (5,17) и (5,18) се установява съотношението

$$R + D = 1. \quad (5,19)$$

Ще изследваме изразите (5,17) и (5,18) в следните частни случаи:

1. Когато  $U < 0$ ,  $k_{II}$  е реално число. В този случай имаме отразена и преминала вълна. Понеже  $k_{II} > k_I$ , то според (5,12),  $B < 0$ , т.е. във фазата на отразената вълна се прибавя  $\pi$ . Ако  $|U| \gg 1$ , то  $k_{II} \gg 1$  и  $B \approx -A$ , т.е. бариерата действа като идеално огледало;
2. Когато  $0 < U < E$ , случаят не се отличава от първия съществено;
3. Когато  $0 < E < U$ , числото  $k_{II}$  е чисто имагинерно. В този случай се полага  $k_{II} = ik_2$ , където  $k_2 > 0$ . Преминалата вълна ще има вида

$$\Psi_{II}(x) = C e^{-k_2 x}, \quad (5,20)$$

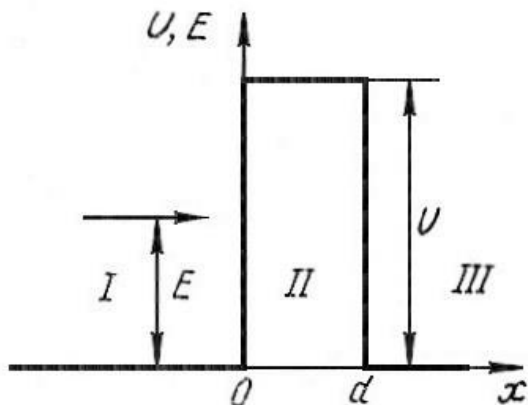
т.е. вълната затихва експоненциално във втората област. Амплитудите  $B$  (на отразената вълна) и  $C$  (на преминалата вълна) са комплексни величини. Коэффициентът на отражение, съгласно (5,12) и (5,17), е  $R = 1$ . В областта  $II$  частицата преминава, съгласно (5,20), на дълбочина  $\delta_x = \frac{1}{k_2}$  и се връща обратно в област  $I$ . Плътността на вероятността частицата да се намира в точка от област  $II$  се определя от израза

$$|\Psi_{II}(x)|^2 = \frac{4k_I}{k_I^2 + k_2^2} e^{-2k_2 x}. \quad (5,21)$$

Очевидно, при  $x \gg \delta_x$ , плътността на вероятността частицата да се намира в областта  $II$  е много малка величина.

## 2. Потенциална бариера с крайна ширина

Разглеждаме преминаването на частица с енергия  $E$  през правоъгълна потенциална бариера с ширина  $d$  и височина  $U > E$  (фиг. 5.2) :



фиг. 5.2

$$U = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ U, & 0 \leq x \leq d, \\ 0 & x > d. \end{cases}$$

На основата на решението на предната задача, можем да запишем решенията на уравнението на Шрьодингер за трите области (I, II и III) :

$$\Psi_I(x) = a_1 e^{ik_1x} + b_1 e^{-ik_1x}, \quad x < 0, \quad (5,22)$$

$$\Psi_{II}(x) = a_2 e^{-kx} + b_2 e^{kx}, \quad 0 \leq x \leq d, \quad (5,23)$$

$$\Psi_{III}(x) = a_3 e^{ik_1(x-d)}, \quad x > d, \quad (5,24)$$

където

$$k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(U - E)}. \quad (5,25)$$

Полагаме  $a_1 = 1$ . Тогава коефициентът на прозрачност, съгласно (5,18), е

$$D = |a_3|^2. \quad (5,26)$$

Амплитудата  $a_3$  намираме от системата линейни алгебрични уравнения, която се получава от използването на условията за непрекъснатост на вълновата функция и нейната първа производна на границите между областите :

$$\Psi_I(0) = \Psi_{II}(0) \quad \Rightarrow \quad 1 + b_1 = a_2 + b_2, \quad (5,27)$$

$$\Psi'_I(0) = \Psi'_{II}(0) \quad \Rightarrow \quad ik_1(1 - b_1) = k(b_2 - a_2), \quad (5,28)$$

$$\Psi_{II}(d) = \Psi_{III}(d) \quad \Rightarrow \quad a_2 e^{-kd} + b_2 e^{kd} = a_3, \quad (5,29)$$

$$\Psi'_{II}(d) = \Psi'_{III}(d) \quad \Rightarrow \quad -k a_2 e^{-kd} + k b_2 e^{kd} = ik_1 a_3. \quad (5,30)$$

От (5,29) и (5,30) можем да изразим амплитудите  $a_2$  и  $b_2$  чрез  $a_3$  :

$$a_2 = \frac{(k - ik_1)}{2k} a_3 e^{kd} , \quad b_2 = \frac{(k + ik_1)}{2k} a_3 e^{-kd} . \quad (5,31)$$

Ако отчетем, че  $e^{kd} \gg e^{-kd}$  , можем да положим  $b_2 \approx 0$  и така да опростим изчисленията. Указаното неравенство е проверено [9] за случая на електрон, за който  $U - E = 100$  eV и  $d = 1 \text{ \AA}$  , величината  $kd \approx 5$  и следователно,  $e^5 \gg e^{-5}$ .

При  $b_2 = 0$  уравненията (5,27) и (5,28) приемат вида:

$$1 + b_1 = a_2 , \quad (5,32)$$

$$ik_1(1 - b_1) = -ka_2 , \quad (5,33)$$

откъдето намираме  $a_2$  :

$$a_2 = \frac{2k_1}{k_1 + ik} . \quad (5,34)$$

Тогава, съгласно (5,31),

$$a_3 = \frac{4kk_1}{(k_1 + ik)(k - ik_1)} e^{-kd} , \quad (5,35)$$

откъдето за коефициента на прозрачност се получава

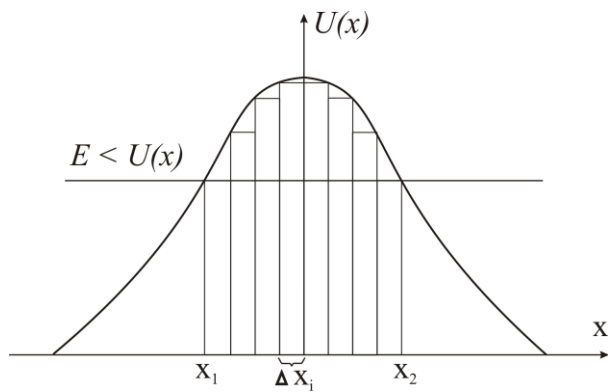
$$D = |\Psi_{III}|^2 = |a_3|^2 = \frac{16}{\left(\frac{k}{k_1} + \frac{k_1}{k}\right)^2} e^{-2kd} , \quad (5,36)$$

което може да се запише още така :

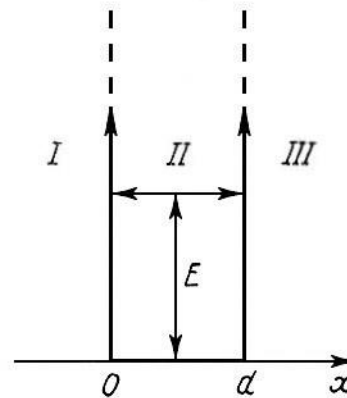
$$D = D_o e^{-\frac{2d}{\hbar} \sqrt{2m(U-E)}} , \quad D_o = \frac{16E(U-E)}{U^2} . \quad (5,37)$$

Трябва да отбележим, че в областта *III* (фиг. 5.2) частицата притежава същата енергия, като тази в област *I* . Преминването на частицата през потенциалната бариера, което е невъзможно според законите на класическата механика, се нарича **тунелен ефект**. Проникването на частицата с енергия  $E < U$  през потенциална бариера е чисто квантовомеханичен ефект, което непосредствено се вижда от формула (5,37) (ако заместим в нея  $\hbar$  с нула, получаваме  $D = 0$ ).

Изхождайки от съотношението за неопределеност (2,63), може да се покаже, че преминаването на частица с енергия  $E < U$  през потенциалната бариера не противоречи на закона за запазване на енергията [9].



фиг. 5.3



фиг. 5.4

Потенцилна бариера с произволна форма може приближено да се представи във вид на редица потенциални бариери с правоъгълна форма (фиг. 5.3). Коефициентът на прозрачност в този случай може да се определи като произведение на коефициентите на прозрачност на отделните бариери [2] :

$$D_i = D_{oi} e^{-\frac{2\Delta x_i}{\hbar} \sqrt{2m(U(x_i) - E)}} , \quad (5,38)$$

т.е.

$$D = \prod_i D_i = D_o e^{-\frac{2}{\hbar} \sum_i \sqrt{2m(U(x_i) - E)} \Delta x_i} . \quad (5,39)$$

Сумата, фигурираща в експонентата, може да се представи с интеграл, ако броят на правоъгълните бариери расте неограничено така, че  $\Delta x_i$  да клонят към нула. Така, в случай на потенциална бариера  $U(x)$  с произволна форма, коефициентът на прозрачност  $D$  се определя от израза

$$D = D_o e^{-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(U(x) - E)} dx} . \quad (5,40)$$

Последната зависимост намира широко приложение в различни области на физиката – например, при изследване на  $\alpha$ -разпад на атомните ядра, студена емисия на електрони от метал под въздействие на външно електрично поле и др.

### 3. Безкрайно дълбока потенциална яма

Ще решим уравнението на Шрьодингер за частица, намираща се в безкрайно дълбока потенциална яма с ширина  $d$  (фиг. 5.4). Уравнението на Шрьодингер в областта II ще запишем във вида

$$\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + k^2\Psi(x) = 0 , \quad (5,41)$$

където

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} . \quad (5,42)$$

Общото решение на уравнението (5,41) е

$$\Psi(x) = C_1 e^{-ikx} + C_2 e^{ikx} . \quad (5,43)$$

Константите  $C_1$  и  $C_2$  намираме от граничните условия и условието за нормировка. Лесно се вижда, че поради безкрайната дълбочина на потенциалната яма, вероятността да намерим частицата извън нея е равна на нула. Действително, при определена пълна енергия на частицата  $E$ , в областите  $I$ ,  $(-\infty < x < 0)$  и  $III$ ,  $(d < x < +\infty)$  имаме

$$\frac{1}{\Psi_{I(III)}} \frac{d^2 \Psi_{I(III)}}{d x^2} = \frac{2m}{\hbar^2} (U - E) = \infty , \quad (5,44)$$

откъдето  $\Psi_I = \Psi_{III} = 0$ . Тъй като вълновата функция  $\Psi(x)$  трябва да бъде непрекъснатата в точките  $x = 0$  и  $x = d$ , имаме

$$\Psi(0) = C_1 + C_2 = 0, \quad \Psi(d) = C_1 e^{-ikd} + C_2 e^{ikd} = 0,$$

откъдето

$$C_2 = -C_1 = C, \quad e^{ikd} - e^{-ikd} = 0 . \quad (5,45)$$

Следователно

$$\sin(kd) = 0 ,$$

т.е.

$$kd = n\pi, \quad k = \frac{n\pi}{d} , \quad (5,46)$$

където  $n = 1, 2, \dots$ . При  $n = 0$  имаме тривиално решение.  $n \neq -1, -2, \dots$ , защото от (5,46) се вижда, че  $k(-n) = -k(n) \Rightarrow \Psi_{-n}(x) = \text{const} \Psi_n(x)$ , т.е.  $\Psi_n(x)$  и  $\Psi_{-n}(x)$  описват едно и също състояние. От (5,42) и (5,46) следва, че енергията на частицата в безкрайно дълбока потенциална яма трябва да има само дискретни стойности

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{n^2 \pi^2}{d^2} . \quad (5,47)$$

Разстоянието между две съседни енергетични нива

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2md^2} (2n + 1) \quad (5,48)$$

се увеличава с намаляване на масата на частицата  $m$  и ширината на ямата  $d$ . Относителното разстояние между две съседни енергетични нива

$$\frac{\Delta E_n}{E_n} = \frac{2n+1}{n^2} \quad (5,49)$$

клони към нула, при  $n \rightarrow \infty$ . Дискретният характер на квантовите състояния престава да се проявява при големи квантови числа  $n$  и фактически настъпва преход към непрекъснато изменение на енергията.

Състоянието с най-малка енергия (*основно състояние*) се получава при  $n=1$  и съответната енергия е

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2md^2}. \quad (5,50)$$

Стойността на енергията (5,50) може да се определи също така и в съответствие със съотношението за неопределеност (2,63). Действително, неопределеността на координатата на частицата е  $\Delta x \sim d$ , а неопределеността на импулса –  $\Delta p_x \sim \frac{\hbar}{d}$ . Следователно, най-малката енергия ще е  $\frac{p^2}{2m} \geq \frac{\hbar^2}{2md^2}$ , т.е. от порядъка на  $E_1$ .

Вълновата функция на  $n$ -тото състояние, съгласно (5,43), (5,45) и (5,46), е от вида

$$\Psi_n(x) = A_n \sin \frac{n\pi x}{d}, \quad (5,51)$$

където константата  $A_n$  се определя от условието за нормировка

$$\int_0^d |\Psi_n(x)|^2 dx = 1$$

и е

$$A_n = \sqrt{\frac{2}{d}}. \quad (5,52)$$

Следователно

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{d}} \sin\left(\frac{n\pi}{d}x\right) \Rightarrow \Psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{2}{d}} \sin\left(\frac{n\pi}{d}x\right) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}.$$

Можем да обобщим получените резултати :

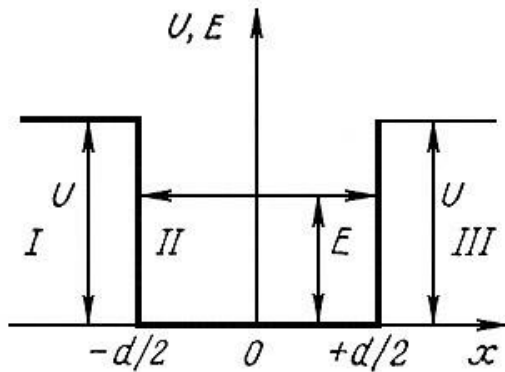
1. Спектърът е неизроден и дискретен. Съществува теорема която гласи, че за всяко едномерно движение дискретният спектър е неизроден, доказателството на която може да се намери в [13];
2. Вътре в интервала  $0 < x < d$ ,  $\Psi_n(x)$  се анулира  $n-1$  пъти. Според така наречената *осцилационна теорема* [13], за всеки едномерен случай с



дискретна част на спектъра,  $\Psi_n(x)$  се анулира  $n-1$  пъти ( $n=1, 2, \dots$ ) вътре в интервала, където спектърът е дискретен.

#### 4. Потенциална яма с крайна дълбочина

Ще разгледаме поведението на частица с маса  $m_0$  в потенциална яма с дълбочина  $U$  и ширина  $d$ , когато енергията на частицата  $E < U$  (фиг. 5.5). Решенията на уравнението на Шрьодингер в трите области имат вида:



фиг. 5.5

$$\Psi_I(x) = A e^{kx}, \quad (5,53)$$

$$\begin{aligned} \Psi_{II}(x) &= C_1 e^{-ik_1x} + C_2 e^{ik_1x} = \\ &= C'_1 \sin k_1x + C'_2 \cos k_1x = \\ &= C \sin(k_1x + \delta) \end{aligned} \quad (5,54)$$

$$\Psi_{III}(x) = B e^{-kx}, \quad (5,55)$$

където

$$k = \sqrt{\frac{2m_0(U-E)}{\hbar^2}}, \quad k_1 = \sqrt{\frac{2m_0E}{\hbar^2}}. \quad (5,56)$$

Решенията  $\Psi_I(x)$  и  $\Psi_{III}(x)$  са написани с отчитане на това, че те трябва да клонят към нула, при  $x \rightarrow \pm\infty$ .

Тук няма да определяме всички константи  $A, B, C$  и  $\delta$ , които се намират лесно чрез “съшиване” на функциите  $\Psi_I(x)$  и  $\Psi_{II}(x)$  в точката  $x = -\frac{d}{2}$  и на  $\Psi_{II}(x)$  и  $\Psi_{III}(x)$  в точката  $x = \frac{d}{2}$ , а само ще покажем, че и частица, намираща се в потенциална яма с крайна дълбочина, в случая  $E < U$  притежава дискретен спектър на енергията.

От условието за непрекъснатост на вълновата функция и нейната първа производна на границите  $I - II$  и  $II - III$  следва:

$$\frac{\Psi'_I\left(-\frac{d}{2}\right)}{\Psi_I\left(-\frac{d}{2}\right)} = \frac{\Psi'_{II}\left(-\frac{d}{2}\right)}{\Psi_{II}\left(-\frac{d}{2}\right)} \Rightarrow k = k_1 \cotg\left(-\frac{k_1d}{2} + \delta\right), \quad (5,57)$$

$$\frac{\Psi'_{III}\left(\frac{d}{2}\right)}{\Psi_{III}\left(\frac{d}{2}\right)} = \frac{\Psi'_{II}\left(\frac{d}{2}\right)}{\Psi_{II}\left(\frac{d}{2}\right)} \Rightarrow -k = k_1 \cot g\left(\frac{k_1 d}{2} + \delta\right). \quad (5,58)$$

От (5,57) и (5,58) получаваме

$$\cot g\left(\frac{k_1 d}{2} + \delta\right) = -\cot g\left(-\frac{k_1 d}{2} + \delta\right),$$

$$\frac{k_1 d}{2} + \delta = \frac{k_1 d}{2} - \delta + n\pi,$$

откъдето

$$\delta = \frac{n\pi}{2}, \quad n \in \mathbf{N}. \quad (5,59)$$

Заместваме (5,59) в (5,58):

$$-k = k_1 \cot g\left(\frac{k_1 d}{2} + n \frac{\pi}{2}\right). \quad (5,60)$$

Тъй като  $n = 0, 1, 2, \dots$  и  $k$  и  $k_1$  са свързани с енергията чрез съотношенията (5,56), условието (5,60) се изпълнява само за дискретни стойности на енергията  $E_n$ . В зависимост от четността или нечетността на числото  $n$ , равенството (5,60) има вида:

$$\text{При } n = 2m \text{ (четно),} \quad -k = k_1 \cot g \frac{k_1 d}{2}; \quad (5,61)$$

$$\text{При } n = 2m + 1 \text{ (нечетно),} \quad k = k_1 \operatorname{tg} \frac{k_1 d}{2}. \quad (5,62)$$

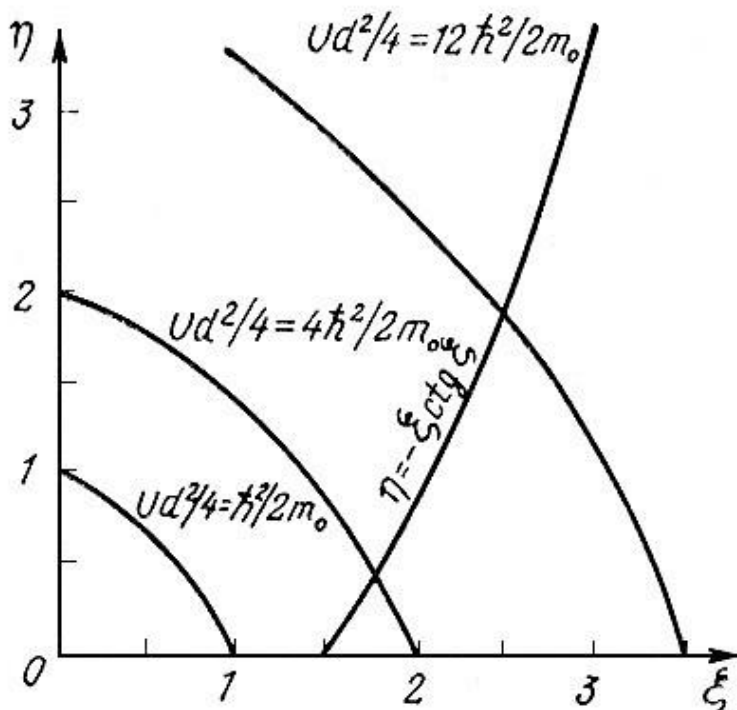
Дискретните стойности  $E_n$  се намират по графичен метод. Умножаваме (5,61) с  $\frac{d}{2}$  и въвеждаме означенията  $\xi = \frac{k_1 d}{2}$  и  $\eta = \frac{kd}{2}$ . Тогава (5,61) се записва във вида

$$\eta = -\xi \cot g \xi. \quad (5,63)$$

С отчитане на (5,56), лесно се получава уравнението

$$\xi^2 + \eta^2 = \frac{m_o U d^2}{2\hbar^2}. \quad (5,64)$$

Търсените стойности на  $E_n$  се определят от точките на пресичане на окръжността с уравнение (5,64) и кривата, зададена с уравнение (5,63). На фиг. 5.6 е дадено графично решение на уравненията (5,63) и (5,64) за три стойности на величината  $\frac{Ud^2}{4}$  [9].



фиг. 5.6

Аналогично се решава графично и уравнението  $\eta = \xi \operatorname{tg} \xi$ , което се получава от (5,62), съвместно с уравнение (5,64).