

Лекция 6.

Туннельный эффект.

Рассмотрим теперь одно из важнейших квантовомеханических явлений, которое делает движение частиц принципиально неклассическим. Речь идет о так называемом туннельном эффекте – возможности туннелирования (просачивания) частицы через область классически запрещенного движения.

Качественно понять происхождение такого эффекта можно на основе анализа рассмотренной выше задачи о стационарных состояниях частицы в потенциальной яме конечной глубины. Мы видели (см. Л_5), что в области классически запрещенного движения волновая функция, описывающая состояние частицы, отлична от нуля, причем

$$\psi(x) \sim \exp(-\kappa x),$$

где x – удаление частицы от классической точки поворота, а $\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)/\hbar^2}$ (см. рис.6.1). Это значит, что вероятность обнаружить частицу в области классически запрещенного движения (под барьером) на глубине d есть

$$D \sim |\psi(x=d)|^2 \sim \exp(-2\kappa d) = \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)} d\right). \quad (6.1)$$

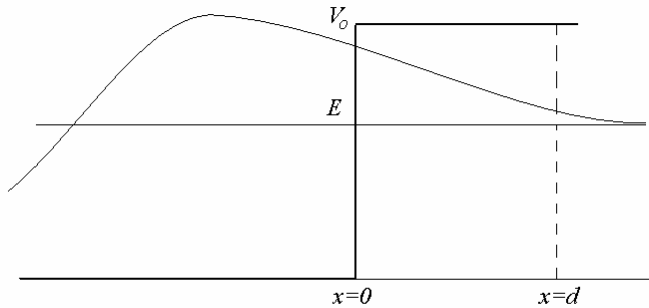


Рис.6.1. Проникновение частицы в область классически запрещенного движения.

Если рассматривать частицу в яме, отделенной от области инфинитного движения потенциальным барьером конечной ширины d (см. рис.6.1), то интуитивно ясно, что выражение (6.1) определяет вероятность проникновения (туннелирования) частицы через потенциальный барьер. Величину D называют также туннельной проникаемостью (прозрачностью) барьера.

Нетрудно обобщить полученный результат на случай потенциаль-

ного барьера произвольной формы (см. рис.6.2). Пусть поток частиц с энергией E налетает на потенциальный барьер, описываемый функцией $V(x)$, слева, причем $E < \max(V(x))$. Тогда с классической точки зрения частицы дошли бы до точки с координатой x_1 (классическая точка поворота) и отразились бы от потенциального барьера. Квантовомеханическое просачивание частиц в подбарьерную область приводит к тому, что с ненулевой вероятностью они могут оказаться в другой области классически разрешенного движения ($x \geq x_2$), т.е. протуннелировать через барьер. По аналогии с (6.1) для вероятности этого процесса запишем

$$D \sim \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(V(x) - E)} dx\right), \quad (6.2)$$

где интеграл берется по области классически запрещенного движения. Очевидно, в частном случае потенциального барьера прямоугольной формы выражение (6.2) переходит

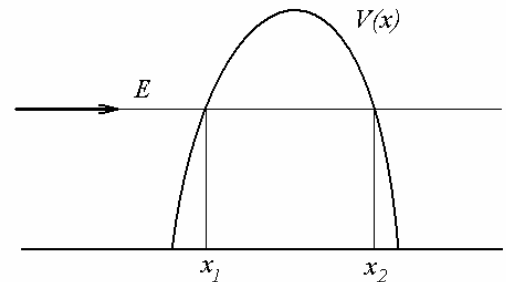


Рис.6.2. К вопросу об определении вероятности туннелирования.

в (6.1). Как видно из (6.2), вероятность туннелирования экспоненциально сильно зависит от ширины потенциального барьера и его высоты (точнее высоты потенциала в области классически запрещенного движения). Также видно, что вероятность туннелирования быстро убывает с ростом массы частицы. Именно последнее обстоятельство приводит к тому, что туннелирование практически никогда не наблюдается для макроскопических объектов.

Наши рассуждения являются, конечно, нестрогими и не позволяют определить, в том числе, предэкспоненциальный множитель в выражении (6.2). Более строгий анализ рассмотренной ситуации для случая потенциального барьера прямоугольной формы содержится в Приложении 2. В общем случае выражение (6.2) может быть получено в рамках так называемого квазиклассического приближения в квантовой механике.

Рассмотрим теперь несколько явлений, некоторые из которых были известны задолго до создания квантовой механики, физическую суть которых удалось понять только в рамках концепции туннелирования.

Автоэлектронная эмиссия.

Автоэлектронной эмиссией называют явление испускания электронов проводящими телами под действием внешнего электрического поля достаточно большой напряженности. В отличие от термоэлектронной эмиссии, когда эмиссионный ток возникает в результате нагрева поверхности и образования некоторой доли «горячих» электронов, способных покинуть поверхность, автоэлектронная эмиссия не связана с нагревом поверхности и потому называется холодной или полевой эмиссией. Явление автоэлектронной эмиссии было экспериментально обнаружено Р.Вудом¹ в 1897 году, в 1928-1929 году Р.Фаулером² и Л.Нордхеймом³ была предложена теоретическая модель, в основе которой лежит представление о туннелировании электронов через потенциальный барьер.

Действительно, металлический проводник для находящихся в нем свободных электронов представляет потенциальную яму глубиной V_0 , схематический вид которой

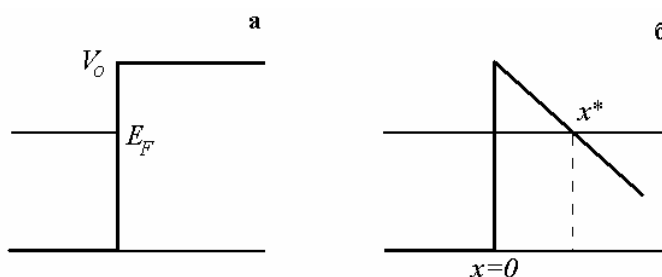


Рис.6.3. Потенциальный рельеф для электронов вблизи границы металл - вакуум в отсутствие и при наличии внешнего электростатического поля.

представлен на рис.6.3а. Электроны в этой яме занимают различные энергетические состояния, причем при нулевой температуре все состояния с энергией большей E_F (энергия Ферми) являются свободными, а все нижележащие – занятыми. Энергия, отсчитываемая от уровня E_F до границы потенциальной ямы, есть работа выхода, т.е. минимально необходимая энергия, которую надо сообщить электрону, чтобы он был способен покинуть поверхность металла. При помещении металла во внешнее электростатическое поле с напряженностью ε на пути электронов с поверхности металла возникает потенциальный барьер конечной ширины (см. рис.6.3б).

$$V(x) = V_0 - e\varepsilon x. \quad (6.3)$$

¹ R.W.Wood (1868-1955) – американский физик – экспериментатор.

² W.A.Fowler (р.1911) – американский физик, Нобелевская премия (1938) "За теоретическое и экспериментальное исследование ядерных реакций..."

³ L.Nordheim(1899-?) – физик – теоретик.

Здесь точка $x = 0$ выбрана на границе раздела металл – вакуум, а энергия отсчитывается от уровня Ферми. Туннельную прозрачность барьера легко оценить по формуле

$$D \sim \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_0^{x^*} \sqrt{2m(V_0 - E_F - e\epsilon x)} dx\right), \quad (6.4)$$

где, как нетрудно видеть из рис.6.3б, классическая точка поворота x^* определяется из условия

$$V_0 - E_F = e\epsilon x^*.$$

Вычисляя интеграл и учитывая, что $V_0 - E_F = A_e$ - работа выхода, из (6.4) находим

$$D \sim \exp\left(-\frac{4}{3} \frac{\sqrt{2mA_e^3}}{e\hbar\epsilon}\right). \quad (6.5)$$

Считая, что плотность тока автоэмиссии пропорциональна туннельной прозрачности барьера для электронов, энергия которых лежит вблизи граничной энергии Ферми, из (6.5) получаем теоретическую зависимость туннельного тока от напряженности электрического поля

$$j \sim \exp(-\alpha/\epsilon), \quad (6.6)$$

где $\alpha = (4/3)\sqrt{2mA_e^3}/e\hbar$. Полученная зависимость (6.6) хорошо согласуется с имеющимися экспериментальными данными.

Явление α - распада атомных ядер.

Еще одним примером квантовомеханического туннелирования является α - распад тяжелых атомных ядер. Вскоре после открытия А.Беккерелем⁴ радиоактивности α - лучами был назван наименее проникающий вид излучения, испускаемый радиоактивными веществами. В 1909 году Э.Резерфорд доказал, что α - частицы являются дважды

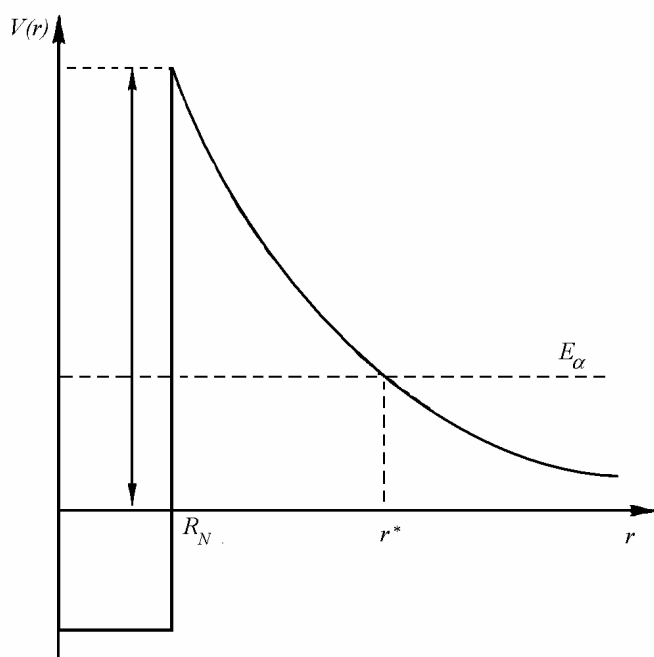


Рис.6.4. К теории α - распада атомных ядер.

ионизованными атомами гелия. Простейшая теория α - распада была предложена Г.Гамовым в 1927 году и исходит из предположения о существовании α - частиц в тяжелых атомных ядрах. Характерный вид потенциала взаимодействия α - частицы с ядром – остатком (его заряд $Z' = Z - 2$) представлен на рис.6.4. На больших расстояниях по сравнению с размером атомного ядра R_N этот потенциал определяется кулоновским отталкиванием

$$V(r > R_N) = 2Z'e^2/r,$$

на расстояниях меньше и порядка размера атомного ядра оказываются существенными ядерные силы, которые приводят к возникновению потенциальной ямы. Форма ее точно не

⁴ А.Беккерел (1852-1908) – французский физик, Нобелевская премия (1903).

определена, но в первом приближении можно считать, что ее размер совпадает с размером ядра R_N , а стенки являются вертикальными. Если энергия α - частицы в ядре оказывается больше нуля (за нулевое значение энергии мы принимаем энергию неподвижной α - частицы на бесконечном удалении от ядра-остатка), то на ее пути из ядра лежит потенциальный барьер конечной проницаемости (см. рис.6.4). Очевидно, вероятность туннелирования через этот барьер может быть оценена по формуле

$$D \sim \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_{R_N}^{r^*} \sqrt{2M_\alpha \left(\frac{2Z'e^2}{r} - E_\alpha\right)} dr\right), \quad (6.7)$$

где E_α и M_α - энергия вылетающей α - частицы ее масса, а верхний предел интегрирования определяется из условия

$$r^* = 2Z'e^2/E_\alpha.$$

Интеграл (6.7) легко приводится к виду $\int \sqrt{1-1/x} dx$ и затем вычисляется с помощью подстановки $x = \sin^2 \xi$. В предположении, что размер ядра $R_N \ll r^*$, получим

$$D \sim \exp\left(-\frac{4\pi Z'e^2}{\hbar v_\alpha}\right), \quad (6.8)$$

где $v_\alpha = \sqrt{2E_\alpha/M_\alpha}$ - скорость вылетающей α - частицы.

Время жизни (или период полураспада) α - радиоактивных ядер обратно пропорциональны величине прозрачности барьера. Поэтому теория предсказывает резкое возрастание времени жизни ядра относительно α - распада с увеличением заряда (при одном и том же значении энергии α - частицы) и, наоборот, уменьшение на порядки величины времени жизни даже при небольшом увеличении энергии E_α . Эти закономерности действительно подтверждаются экспериментально.

Туннельная ионизация атомов в оптическом поле.

Выше мы рассмотрели явление автоэлектронной эмиссии. Аналогично может быть рассмотрен процесс ионизации атомов сильным электростатическим полем. Действительно, если $V_a(x)$ есть атомный потенциал, то при помещении атома во внешнее электростатическое поле, потенциал, в котором движется атомный электрон, может быть представлен в виде

$$V(x) = V_a(x) - e\epsilon x. \quad (6.9)$$

Тогда электрон может покинуть атом, протуннелировав через потенциальный барьер (см. рис.6.5). Если атом находится в поле электромагнитной волны, то выражение (6.9)

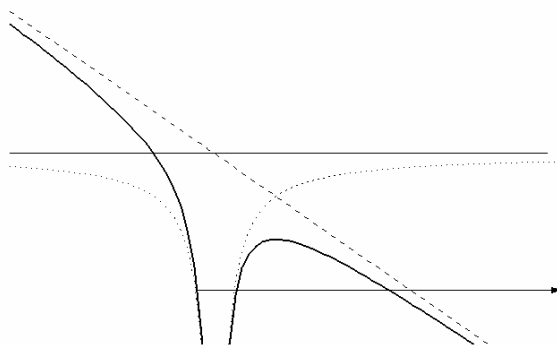


Рис.6.5. Ионизация атома в сильном электростатическом поле.

также справедливо, но напряженность поля волны является функцией времени

$$\epsilon(t) = \epsilon_0 \cos \omega t.$$

Это приводит к тому, что барьер конечной проницаемости попеременно возникает то слева от атома, то справа (см. рис.6.6), причем время, на которое барьер открывается, составляет величину порядка половины периода электромагнитной волны. Если элек-

трическое поле является низкочастотным, то процесс туннелирования происходит практически также как в статическом поле. В 1964 году Л.В.Келдышем⁵ при рассмотрении задачи о фотоионизации атомов сильным электромагнитным полем было показано, что статический туннельный предел реализуется в области значений

$$\gamma = \frac{\omega\sqrt{2mI}}{e\epsilon_0} \ll 1 \quad (6.10)$$

(I - потенциал ионизации, γ - параметр Келдыша). При выполнении условия (6.10) можно говорить о туннельном механизме фотоионизации атомов, т.е. вероятность фото-

ионизации w_i определяется вероятностью туннелирования электрона из атома

$$w_i \sim D \sim \exp\left(-\frac{4}{3} \frac{\sqrt{2mI^3}}{e\hbar\epsilon_0}\right). \quad (6.11)$$

При этом существенно, что рассмотренный туннельный механизм фотоионизации реализуется, в том числе, в инфракрасном диапазоне частот.

Рис.6.6. Туннельная ионизация атома в высокочастотном поле.

поле излучения мощного CO₂ лазера впервые наблюдалась в 1985 году в экспериментах С.Л.Чина⁶.

Экспериментально туннельная ионизация атомов инертных газов в

Туннельный микроскоп.

Туннельный микроскоп - это прибор (предложен Г.Биннингом и Г.Рорером в 1982 году), предназначенный для изучения свойств электропроводящих поверхностей, в основе работы которого лежит туннельный эффект. Общий принцип работы туннельного микроскопа ясен из рис.6.7. Основным элементом туннельного микроскопа является металлическое острие (STM tip) с радиусом кривизны у вершины вплоть до 1 А. При приближении такого острия к проводящей поверхности на расстояние 3 – 10 А тун-

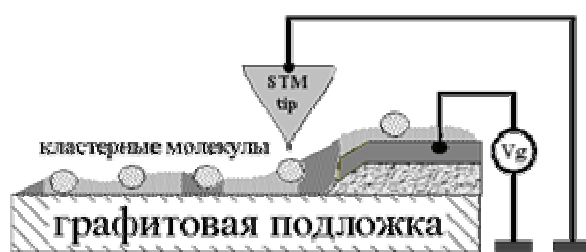


Рис.6.7. Туннельный микроскоп.

нельная проницаемость потенциального барьера между острием и образцом оказывается конечной и при приложении напряжения к контакту возникает туннельный ток. Обычные его значения составляют 1 – 10 нА при разности потенциалов от единиц миллиВольт до нескольких Вольт. Вероятность туннелирования, а,

следовательно, и величина туннельного тока, экспоненциально сильно зависят от ширины зазора между острием и образцом. Поэтому при движении иглы микроскопа вдоль поверхности образца с некоторой скоростью величина туннельного тока изменяется, отслеживая изменение рельефа поверхности⁷. Разрешающая способность микроскопа яв-

⁵ Л.В.Келдыш (р.1931) – российский физик – теоретик.

⁶ S.L.Chin – канадский физик – экспериментатор.

⁷ На практике, как правило, с помощью обратной связи поддерживают постоянным значение туннельного тока, а движение иглы микроскопа отслеживает изменение рельефа поверхности.

ляется уникальной – она достигает величины порядка одного ангстрема вдоль поверхности образца и сотых долей ангстрема по высоте рельефа. Туннельный микроскоп позволяет также регистрировать на поверхности локальные области с пониженной или повышенной работой выхода. При доступном пространственном разрешении оказывается возможным диагностировать молекулярные кластеры и даже единичные атомы или молекулы, адсорбированные на поверхности.

Туннельный эффект: оптическая аналогия.

Туннельный эффект представляет собой несомненно загадочное явление с точки зрения классической механики. Казалось бы, вероятность обнаружить частицу в области классически запрещенного движения противоречит закону сохранения энергии, поскольку величина кинетической энергии заведомо положительна. Однако, надо иметь в виду, что в каждый момент времени состояние частицы описывается ψ - функцией, волновым полем, причем это состояние заведомо не характеризуется точно определенными значениями кинетической и потенциальной энергии. Экспериментальное обнаружение частицы в подбарьерной области, очевидно, предполагает измерение ее координаты с достаточно высокой точностью, что неизбежно ведет к изменению волновой функции системы и сопровождается изменением ее энергии. Важно понимать, что представление о туннелировании, как о процессе, в ходе которого некоторое время частица находится в подбарьерной области неверно. Такой ситуации соответствовало бы распределение плотности вероятности $|\psi|^2$, отличное от нуля только в области классически запрещенного движения в течение некоторого конечного интервала времени. На самом деле область локализации частицы в процессе туннелирования всегда значительно больше ширины потенциального барьера, поэтому представление о том, что частица находится в подбарьерной области, не соответствует действительности ни для какого момента времени.

В то же время установленная нами аналогия между движением частицы в квантовой механике и волновым процессом в оптике позволяет найти оптический аналог явлению туннелирования. Рассмотрим явление прохождения световой волны через среду с кусочно-непрерывным показателем преломления, например, систему стеклянных пластинок, разделенных вакуумным зазором (см. рис.6.8). Известно, что при падении электромагнитной волны из оптически более плотной среды на оптически менее плотную при определенных условиях (угол падения превышает некоторый критический) возникает явление полного внутреннего отражения. Такая ситуация как раз может быть реализована на границе раздела стекло – вакуум. Свет целиком отражается от границы раздела, однако в оптически менее плотной среде возникает осциллирующее поле, экспоненциально спадающее по мере удаления вглубь от границы раздела. При большой ширине вакуумного зазора наличие второй стеклянной пластинки никак не скажется на процессе отражения от границы раздела. Однако, если вакуумный зазор является достаточно уз-

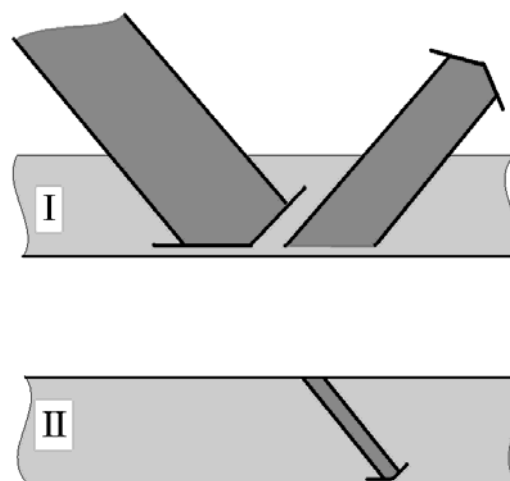


Рис.6.8. Оптический аналог туннельного эффекта (прохождение пучка света через систему стеклянных пластинок, разделенных вакуумным зазором).

ким (его ширина не должна существенно превышать глубины проникновения электрического поля в вакуум), то в пластинке II тем не менее возникнет волновое поле, распространяющееся от границы раздела. Рассмотренный эффект полностью аналогичен эффекту квантовомеханического туннелирования. В рамках оптико-механической аналогии вакуумный зазор эквивалентен потенциальному барьеру конечной ширины, экспоненциально убывающее электрическое поле – экспоненциально убывающей волновой функции в области классически запрещенного движения, а проходящая световая волна через систему «стекло – вакуум – стекло» – квантовомеханическому туннелированию частицы.

Периодический потенциал.

Мы уже отмечали, что атом создает для электронов некоторую потенциальную яму. Рассмотрим теперь одномерную цепочку атомов, расположенных друг от друга на некотором расстоянии d . Если величина d много больше характерного атомного размера, то мы имеем совокупность изолированных атомов. Если же мы сближаем атомы так, что расстояние между ними оказывается порядка атомного размера, то наша система представляет собой простейшую модель кристалла. Характерный вид потенциала $V(x)$ в такой системе имеет вид, изображенный на рис.6.9. Пусть изолированный атом характеризуется некоторой системой энергетических уровней. Очевидно, электрон, локализованный первоначально в одной из потенциальных ям, может протуннелировать в соседние ямы. Поэтому время жизни электрона в конкретной яме τ оказывается конечным и определяется длительностью процесса туннелирования. Но тогда в силу соотношения неопределенностей для энергии – времени

$$\Delta E \tau \sim \hbar$$

энергия состояния оказывается точно не определена: энергетический уровень размывается и превращается в энергетическую зону шириной ΔE . Отметим также, что проведенные рассуждения показывают, что электрон в периодическом потенциале принадлежит не конкретному атому, а делокализован по всему кристаллу. Очевидно, чем выше положение исходного энергетического состояния в спектре исходного изолированного атома, тем больше вероятность туннелирования, и, следовательно, тем больше ширина энергетической зоны. Таким образом, мы приходим к выводу о существовании зонной структуры энергетического спектра кристаллов. Дискретные атомные уровни превращаются в разрешенные энергетические зоны, разделенные друг от друга запрещенными зонами (см. рис.6.9). Иногда зоны, созданные двумя различными атомными уровнями могут перекрываться, создавая единую разрешенную энергетическую зону. Зоны, полностью заполненные электронами, называют валентными, частично заполненные или пустые – зонами проводимости. Если при нулевой температуре в отсутствие внешних воздействий в кристалле имеется не полностью заполненная зона (т.е. в зоне проводимости присутствуют электроны), то такой образец является металлом. Если зона проводимости является пустой, то в зависимости от ширины запрещенной зоны, разделяющей верхнюю валентную зону и нижнюю зону проводимости, образец называют диэлектриком или полупроводником. Например, в кристалле

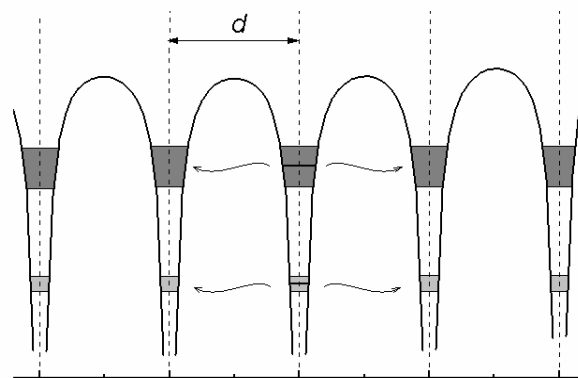


Рис.6.9. Периодический потенциал. Зонная структура спектра.

Иногда зоны, созданные двумя различными атомными уровнями могут перекрываться, создавая единую разрешенную энергетическую зону. Зоны, полностью заполненные электронами, называют валентными, частично заполненные или пустые – зонами проводимости. Если при нулевой температуре в отсутствие внешних воздействий в кристалле имеется не полностью заполненная зона (т.е. в зоне проводимости присутствуют электроны), то такой образец является металлом. Если зона проводимости является пустой, то в зависимости от ширины запрещенной зоны, разделяющей верхнюю валентную зону и нижнюю зону проводимости, образец называют диэлектриком или полупроводником. Например, в кристалле

алмаза (широкозонный диэлектрик) ширина запрещенной зоны составляет 5 эВ, в кристалле кремния (типичный полупроводник) – 1.1 эВ. С повышением температуры (мы, конечно, говорим о диапазоне температур, не превышающих пороговые значения, при которых происходит разрушение кристаллической структуры) в полупроводниках в зоне проводимости появляются электроны, которые приводят к способности полупроводника проводить электрический ток. Поскольку число электронов в зоне проводимости экспоненциально растет с температурой, можно ожидать, что зависимость собственной проводимости полупроводникового материала от температуры также будет экспоненциальной⁸.

Гармонический осциллятор.

Рассмотрим теперь задачу об определении стационарных состояний одномерного гармонического осциллятора. Эта задача является одной из важнейших в квантовой теории. Приближение гармонического осциллятора часто используется в физике молекул при изучении колебательного движения молекул, в теории атомного ядра при изучении низколежащих ядерных состояний, в различных задачах физики твердого тела и т.д. Важно отметить также, что электромагнитное поле также может быть рассмотрено как совокупность полевых мод, каждая из которых является гармоническим осциллятором.

Пусть потенциальная энергия системы записывается в виде

$$V(x) = m\omega^2 x^2 / 2,$$

где ω - частота колебаний. Тогда гамильтониан гармонического осциллятора имеет вид

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}. \quad (6.12)$$

Наша задача заключается в определении собственных функций и собственных значений оператора \hat{H} :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \psi = E \psi,$$

или

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} - \frac{m^2 \omega^2 x^2}{\hbar^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \right) \psi(x) = 0. \quad (6.13)$$

При этом на бесконечности ($x \rightarrow \pm\infty$) волновая функция должна стремиться к нулю. Уравнение (6.13) удобно обезразмерить. Вводя новые безразмерные координату $\xi = x/a$ и энергию $\varepsilon = E/E_0$ ($a = \sqrt{\hbar/m\omega}$, $E_0 = \hbar\omega/2$), перепишем (6.13) в виде

$$\left(\frac{d^2}{d\xi^2} - \xi^2 + \varepsilon \right) \psi(\xi) = 0. \quad (6.14)$$

Начнем решение задачи с анализа асимптотического поведения волновой функции при $\xi \rightarrow \pm\infty$. При больших значениях ξ последним слагаемым в (6.14) можно пренебречь, то есть:

⁸ Мы использовали здесь термин «собственная проводимость», поскольку на практике полупроводники часто легируют, вводя некоторое количество примесных атомов, энергетически уровни которых расположены в запрещенной зоне исходного полупроводника. В зависимости от того, где они располагаются (близко к валентной зоне, или зоне проводимости) возникают полупроводники *p* или *n* типа, проводимость которых может быть значительной уже при комнатных температурах и определяется, прежде всего, уровнем легирования.

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} - \xi^2\psi \approx 0. \quad (6.15)$$

Это уравнение имеет асимптотику

$$\psi \sim \exp(-\xi^2/2).$$

Действительно $\psi'' = (\xi^2 - 1)\exp(-\xi^2/2)$, т.е. для $|\xi| \gg 1$ уравнение (6.15) оказывается выполненным. Будем поэтому искать решение уравнения (6.14) в виде

$$\psi(\xi) = v(\xi)\exp(-\xi^2/2), \quad (6.16)$$

где $v(\xi)$ - некоторая новая неизвестная функция, не меняющая асимптотику функции $\psi(\xi)$ на бесконечности. Подставим представление (6.16) в уравнение (6.14). Тогда учитывая, что

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} = \frac{d}{d\xi}((v' - \xi v)\exp(-\xi^2/2)) = (v'' - v - 2\xi v' + \xi^2 v)\exp(-\xi^2/2),$$

для функции $v(\xi)$ получим новое уравнение

$$v'' - 2\xi v' + (\varepsilon - 1)v = 0. \quad (6.17)$$

Будем искать решение уравнения (6.17) в виде полинома конечной степени ξ , т.е.

$$v(\xi) = \sum_{k=0}^n a_k \xi^k. \quad (6.18)$$

Как мы увидим позже, необходимость искать решение (6.17) именно в виде полинома, а не бесконечного ряда, связана с необходимостью сохранить правильное асимптотическое поведение волновой функции на бесконечности. Подставляя разложение (6.18) в уравнение (6.17) и собирая члены при одинаковых степенях ξ , получим

$$\sum_{k=0}^n ((k+2)(k+1)a_{k+2} + (\varepsilon - 1 - 2k)a_k)\xi^k = 0.$$

Поскольку это равенство должно удовлетворяться при любом значении ξ , получаем следующее рекуррентное соотношение между коэффициентами полинома:

$$a_{k+2} = \frac{2k - (\varepsilon - 1)}{(k+2)(k+1)} a_k. \quad (6.19)$$

Если известны коэффициенты a_0 и a_1 , то остальные можно найти с помощью (6.19). Ряд будет конечным, если на некотором слагаемом с номером n коэффициент a_n обратится в ноль. Из (6.19) имеем, что это возможно если

$$\varepsilon = 2n + 1,$$

или переходя к размерным единицам

$$E_n = \hbar\omega(n + 1/2), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (6.20)$$

Условие обрыва ряда не может быть выполнено одновременно и для четных и для нечетных членов разложения. Поэтому полином (6.19) должен содержать только четные, или только нечетные степени ξ , т.е.

$$a_0 \rightarrow a_2 \rightarrow a_4 \rightarrow \dots, \quad a_1 = a_3 = \dots = 0,$$

или

$$a_1 \rightarrow a_3 \rightarrow a_5 \rightarrow \dots, \quad a_0 = a_2 = \dots = 0.$$

Таким образом, задача решена. Выражение (6.20) определяет энергетический спектр гармонического осциллятора, а волновые функции представимы в виде (6.16), где функции $v(\xi)$ есть полиномы, которые легко построить с помощью соотношения (6.19).

При этом значения коэффициентов a_0 и a_1 должны быть определены из условия нормировки волновой функции.

Если бы мы искали решение уравнения (6.17) в виде бесконечного ряда, то для больших значений k мы бы получили связь между коэффициентами (см. (6.19)):

$$a_{k+2} \approx \frac{2}{k} a_k.$$

Такая связь между коэффициентами возникает при разложении функции

$$\exp(\xi^2) = \sum_{k=0,2,4,\dots}^{\infty} \frac{\xi^k}{(k/2)!},$$

то есть приводит к тому, что волновая функция на бесконечности неограниченно возрастает.

Полиномы, коэффициенты которых удовлетворяют рекуррентному соотношению (6.19), хорошо известны в математике и называются полиномами Эрмита. Приведем явные выражения для первых нескольких полиномов:

$$H_0(\xi) = 1, \quad H_1(\xi) = 2\xi, \quad H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2, \quad H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi, \dots \quad (6.21)$$

Все они являются либо четными, либо нечетными функциями ξ . Значит, в нашем случае стационарные состояния опять характеризуются определенной четностью. Об этом можно было догадаться, конечно, заранее, т.к. легко видеть, что оператор четности коммутирует с гамильтонианом.

Часто бывает удобно использовать и другой способ построения полиномов Эрмита:

$$H_n(\xi) = (-1)^n \exp(\xi^2) \frac{d^n}{d\xi^n} \exp(-\xi^2). \quad (6.22)$$

Выпишем также условие ортонормированности полиномов:

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n(\xi) H_m(\xi) \exp(-\xi^2) d\xi = 2^n n! \sqrt{\pi} \delta_{mn}. \quad (6.23)$$

Эти и некоторые другие свойства полиномов Эрмита более подробно обсуждаются в Приложении 3.

Условие (6.23) позволяет записать удовлетворяющие условию нормировки волновые функции стационарных состояний гармонического осциллятора

$$\psi_n(x) = N_n H_n(x/a) \exp(-x^2/2a^2), \quad (6.24)$$

где нормировочный множитель N_n - определяется как

$$N_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n! a \sqrt{\pi}}}. \quad (6.25)$$

Перейдем теперь к обсуждению свойств полученного решения.

Прежде всего отметим, что энергетический спектр осциллятора строго дискретный, как и у всякой системы совершающей финитное движение. Энергия основного состояния осциллятора отлична от нуля: существуют так называемые нулевые колебания, их энергия оказывается равна

$$E_0 = \hbar\omega/2,$$

и это минимально возможное значение энергии осциллятора.

Происхождение нулевых колебаний нетрудно понять на основе соотношения неопределенностей Гейзенберга. Действительно, локализация частицы в области размером Δx ведет к появлению у нее кинетической энергии $T \sim \hbar^2/2m(\Delta x)^2$. С другой стороны

для частицы с такой областью пространственной локализации, и находящейся в осцилляторном потенциале, величина потенциальной энергии будет составлять $V \sim m\omega^2(\Delta x)^2/2$. Минимум полной энергии $E = T + V$ достигается для вполне определенной пространственной ширины волнового пакета $\Delta x = \sqrt{\hbar/m\omega}$. Для минимально возможного значения энергии осциллятора при этом получаем $E_{\min} = \hbar\omega$. Это значение всего в два раза отличается от точного значения энергии нулевых колебаний осциллятора.

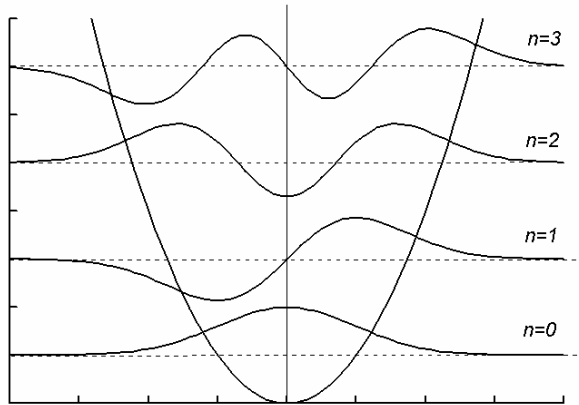


Рис. 6.10. Уровни энергии и волновые функции гармонического осциллятора.

ра.

На рис.6.10 приведено положение нескольких нижних энергетических уровней осциллятора. Для этих же состояний на рис.6.11 представлены распределения плотности вероятности $|\psi(x)|^2$. Важной особенностью энергетического спектра является его эквидистантность, т.е. энергетическое расстояние между любой парой уровней одинаково

$$E_n - E_{n-1} = \hbar\omega.$$

При этом, так же как и в ранее рассмотренных задачах, существует ненулевая веро-

ятность обнаружить частицу в области классически запрещенного движения.

Необходимо отметить, что хотя энергия возбужденного состояния осциллятора может быть весьма велика, средние значения координаты и импульса частицы оказываются равны нулю. В этом легко убедиться прямым вычислением интегралов

$$\langle x \rangle = \int x |\psi(x)|^2 dx,$$

$$\langle p \rangle = \int \psi^*(x) \hat{p} \psi(x) dx.$$

В этом смысле все стационарные состояния соответствуют неподвижной частице. Более того, как мы уже ранее отмечали, распределение плотности вероятности $|\psi|^2$ также не зависит от времени. Однако, средние значения кинетической и потенциальной энергии отличны от нуля. Действительно⁹,

$$\langle T \rangle_n = \langle p^2/2m \rangle_n = \frac{1}{2m} \int \psi_n^* \hat{p}^2 \psi_n dx = \frac{\hbar\omega}{2} (n + 1/2),$$

$$\langle V \rangle_n = \langle m\omega^2 x^2/2 \rangle_n = \frac{m\omega^2}{2} \int \psi_n^* x^2 \psi_n dx = \frac{\hbar\omega}{2} (n + 1/2).$$

При этом для квантовомеханических средних оказывается выполненным равенство средних значений кинетической и потенциальной энергии

$$\langle T \rangle_n = \langle V \rangle_n = E_n/2, \quad (6.26)$$

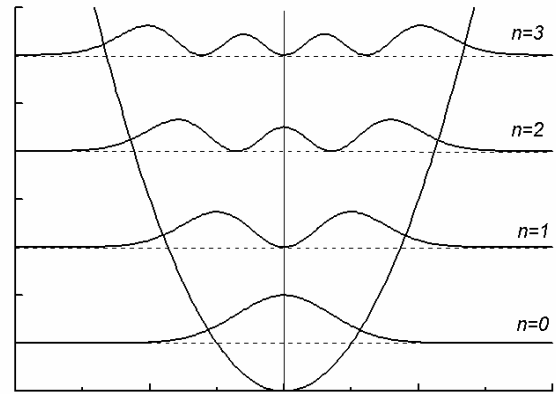


Рис. 6.11. Распределения плотности вероятности для нижних стационарных состояний гармонического осциллятора.

⁹ Эти интегралы легко вычисляются с учетом формул, приведенных в Приложении 3.

знакомое нам по классической механике. Однако, подчеркнем еще раз, в классике речь идет об усреднении по периоду колебательного движения. Выражение (6.26) получено для квантовомеханических средних.

А что такое нестационарные состояния осциллятора? Как «увидеть» колебания частицы (волнового пакета), аналогичные классическим колебаниям? Рассмотрим самый простой случай. Пусть в начальный момент времени состояние частицы описывается волновой функцией, которая является суперпозицией двух нижних стационарных состояний осциллятора:

$$\psi(x, t = 0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_0(x) + \psi_1(x)). \quad (6.27)$$

Тогда, в соответствии с общим способом решения нестационарного уравнения Шредингера, рассмотренным в Л_4, волновая функция системы, удовлетворяющая нестационарному уравнению Шредингера и описывающая эволюцию состояния во времени, запишется в виде

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_0(x) \exp\left(-i \frac{\omega t}{2}\right) + \psi_1(x) \exp\left(-i \frac{3\omega t}{2}\right) \right). \quad (6.28)$$

Для плотности вероятности $\rho(x, t)$ получаем

$$\rho(x, t) = |\psi(x, t)|^2 = \frac{1}{2} |\psi_0(x)|^2 + \frac{1}{2} |\psi_1(x)|^2 + \psi_0(x) \psi_1(x) \cos \omega t. \quad (6.29)$$

Первые два слагаемых в (6.29) не зависят от времени и дают некоторое статическое распределение плотности вероятности, однако третье слагаемое показывает, что плотность вероятности в системе перетекает из одной пространственной области в другую, причем это перетекание происходит с частотой колебаний классической частицы. Чтобы еще более полно установить аналогию с классикой, найдем среднее значение координаты частицы

$$\langle x(t) \rangle = \int x \rho(x, t) dx = \int x \left(\frac{1}{2} |\psi_0(x)|^2 + \frac{1}{2} |\psi_1(x)|^2 + \psi_0(x) \psi_1(x) \cos \omega t \right) dx = x_{01} \cos \omega t, \quad (6.30)$$

где

$$x_{01} = \int x \psi_0(x) \psi_1(x) dx = a/\sqrt{2} = \sqrt{\hbar/2m\omega}.$$

Этот интеграл легко вычисляется с использованием формул Приложения 3. Мы получили, что частица совершает колебательное движение с частотой классических колебаний и амплитудой $x_{01} = \sqrt{\hbar/2m\omega}$.

Таким образом, мы видели, что движение волнового пакета, подобное движению классической частицы в осцилляторном потенциале, возникает только в нестационарном состоянии. В этом смысле стационарные состояния являются чисто квантовыми и не имеют аналога в классической механике.

Можно, однако, попытаться сопоставить квантовомеханические плотности вероятности, соответствующие стационарным состояниям, и распределение вероятности обнаружить классический осциллятор в некотором определенном положении в случайный момент времени. Пусть классическая частица совершает колебательное движение по закону

$$x = x_0 \cos \omega t.$$

Тогда в интервале координат $(x, x + dx)$ частица находится в течение времени dt

$$dt = \frac{dx}{|\dot{x}|} = \frac{dx}{x_0 \omega \sqrt{1 - (x/x_0)^2}}.$$

Поскольку частица проходит все возможные значения своего положения за половину периода, то вероятность обнаружить ее в интервале $(x, x + dx)$ есть

$$dW = \frac{2dt}{T} = \frac{dx}{\pi x_0 \sqrt{1 - (x/x_0)^2}}. \quad (6.31)$$

Как видно, максимальная вероятность для классического осциллятора достигается вблизи точек поворота. Это понятно: вблизи точки поворота скорость частицы мала, и поэтому она там долго находится. Величина

$$\rho_{cl}(x) = \frac{1}{\pi x_0 \sqrt{1 - (x/x_0)^2}}$$

в некотором смысле является классической плотностью вероятности и может быть сопоставлена с квантовомеханическим значением $|\psi(x)|^2$. Зависимости $\rho_{cl}(x)$ и $|\psi(x)|^2$, соответствующие состояниям с определенным значением энергии, представлены на рис.6.12. Как видно, для малых квантовых чисел поведение кривых существенно раз-

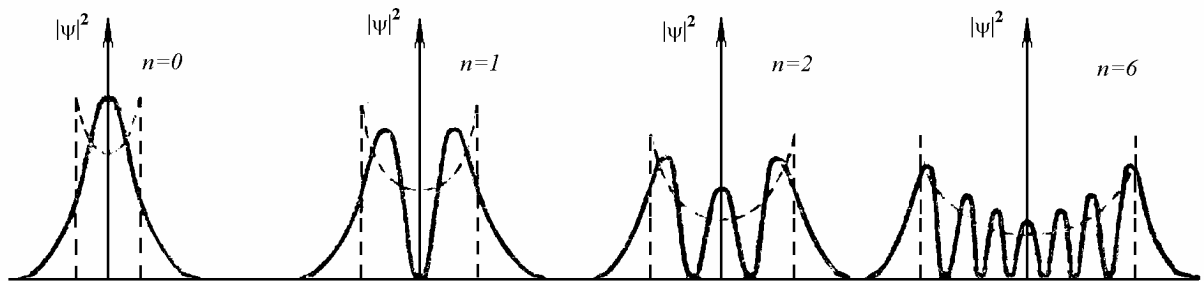


Рис.6.12. Классические и квантовые распределения плотностей вероятности.

лично, однако для больших n (для сильно возбужденных состояний) усредненная кривая для распределения плотности вероятности квантовомеханического осциллятора хорошо согласуется с кривой для классического осциллятора.

Следует, однако, отметить еще раз, что рассмотренная аналогия достаточно условна. Стационарные состояния квантовой системы не имеют классического аналога. Для классической частицы мы имеем зависимости координаты и импульса частицы от времени $x(t)$ и $p(t)$, в то время как квантовомеханические средние $\langle x \rangle$ и $\langle p \rangle$ не зависят от времени и равны нулю для любого стационарного состояния¹⁰. В рассматриваемых нами стационарных состояниях плотность тока вероятности также равна нулю, то есть отсутствует перетекание плотности вероятности из одной точки пространства в другую. Такая картина не имеет ничего общего с гармоническими колебаниями классической частицы в осцилляторном потенциале, также как и с колебаниями квантового волнового пакета, который всегда можно представить в виде суперпозиции некоторого количества стационарных состояний системы.

¹⁰ Следует оговориться. Именно основное состояние квантовой системы (в данном случае, гармонического осциллятора) по своим свойствам наиболее близко к состоянию классического осциллятора с минимальным значением энергии. Действительно, в классической механике состоянию с минимальной энергией соответствует ситуация, когда частица покоится на дне потенциальной ямы, то есть $x(t) \equiv 0$ и $p(t) \equiv 0$. В квантовой теории основному состоянию соответствует волновой пакет с нулевыми средними значениями энергии и импульса, делокализованный вблизи начала координат. С точностью до квантовой неопределенности значений координаты и импульса (и возникающей вследствие этого энергии нулевых колебаний) такое состояние как раз соответствует частице, «лежащей» на дне потенциальной ямы.

Задачи.

- 6.1. Определить величину плотности тока вероятности для состояния $\psi(x) = A \exp(ikx) + B \exp(-ikx)$.
- 6.2. Поток частиц с энергией E рассеивается на прямоугольной потенциальной ступеньке $V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ V_0, & x \geq 0. \end{cases}$ Определить вероятности прохождения и отражения.

Нарисовать графики зависимости $|\psi(x)|^2$ для случаев «подбарьерного» $E < V_0$ и «надбарьерного» $E > V_0$ движения.

- 6.3. Поток частиц с энергией E рассеивается на прямоугольном потенциальном барьере высотой V_0 и шириной a , причем $E > V_0$ (надбарьерное прохождение). Определить энергии, при которых вероятность отражения от барьера равна нулю (резонанс прозрачности).
- 6.4. Поток частиц с энергией E туннелирует через прямоугольный потенциальный барьер высотой V_0 и шириной a , причем $E = V_0$. Определить зависимость прозрачности барьера от его ширины.
- 6.5. Оценить время жизни α - радиоактивных ядер ${}^{222}_{86}\text{Rn}$ и ${}^{238}_{92}\text{U}$. Энергии E_α вылетающих α - частиц соответственно равны 6.6 МэВ и 4.2 МэВ.
- 6.6. Определить средние значения кинетической и потенциальной энергии в основном состоянии линейного гармонического осциллятора.
- 6.7. Волновая функция частицы, находящейся в осцилляторном потенциале $V = m\omega^2 x^2 / 2$, имеет вид

$$\text{а) } \psi(x) = Ax^2 \exp\left(-\frac{1}{2}(x/a)^2\right); \text{ б) } \psi(x) = Ax^3 \exp\left(-\frac{1}{2}(x/a)^2\right); \quad a = \sqrt{\hbar/m\omega}.$$

Определить, какие значения энергии и с какой вероятностью в этих состояниях могут быть измерены.

- 6.8. Определить энергетический спектр и волновые функции стационарных состояний системы связанных линейных гармонических осцилляторов с гамильтонианом $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \alpha(x_1 - x_2)^2$, где $\hat{H}_i = \hat{T}_i + m\omega_0^2 x_i^2 / 2$ - гамильтониан гармонического осциллятора с частотой ω_0 , α - константа связи.
- 6.9. Определить энергии стационарных состояний заряженной частицы, находящейся в гармоническом потенциале $U = m\omega^2 x^2 / 2$, в присутствии внешнего однородного постоянного электрического поля.
- 6.10. Волновая функция частицы, находящейся в гармоническом потенциале, в момент времени $t = 0$ определяется выражением

$$\phi(x) = \sqrt{2/3} \cdot \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{\pi}}} \cdot (1 + x/a) \exp\left(-\frac{1}{2}(x/a)^2\right),$$

где $a^2 = \hbar / m\omega$. Определить среднее значение координаты частицы, как функцию времени.