3.4. Потенциальные барьеры.

3.4.1. Понятие потенциального барьера

Одномерный потенциальный барьер определяется зависимостью потенциальной энергии от координаты $U = U(x)$. Если на каком-то участке координаты x потенциальная энергия возрастает (или падает), то говорят об одномерной потенциальной ступеньке (см рис. 4.1).

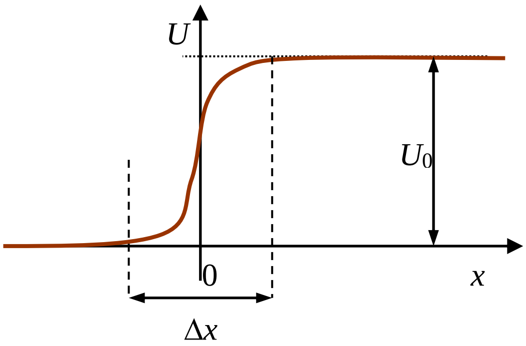

Рис. 4.1.

Рассматриваем такую задачу, когда на одномерную потенциальную ступеньку налетает частица с энергией E. При выполнении условия, что размер области изменения потенциальной энергии Δx мал по сравнению с волной де Бройля налетающей частицы:

$$\Delta x \le \frac{2\pi\hbar}{mv}, \qquad (3.4.1)$$

можно считать барьер достаточно быстро растущим и заменить его прямоугольным потенциальным барьером (рис. 4.2):

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ U_0, & x \ge 0 \end{cases} \qquad (3.4.2)$$

Напомним, что происходит при классическом рассмотрении этого процесса:

1) если энергия налетающей частицы $E < U_0$, тогда частица с достоверностью отражается от барьера и в правую область не проникает
2) если ее энергия $E > U_0$, тогда частица с достоверностью проходит над барьером и в правой области она движется с меньшей кинетической энергией $E_1 = E - U_0$ и меньшей скоростью $v = \frac{2}{m}\sqrt{E - U_0}$.

В рамках квантовомеханического рассмотрения решается уравнение Шредингера в области до потенциального порога $x < 0$ и после порога $x > 0$, а затем решения “сшиваются” на границе ($x = 0$).

3.4.2. Прямоугольная ступенька

Итак, пусть потенциальная энергия имеет вид прямоугольной ступеньки (3.4.2), график которой представлен на рис. 4.2. Рассмотрим уравнение Шредингера для частицы энергии в двух областях: область I – до потенциальной ступеньки ($x < 0$) и область II – после ступеньки ($x > 0$). При этом необходимо отдельно рассмотреть случай, когда энергия частицы меньше величины барьера $E < U_0$ и больше барьера $E > U_0$.

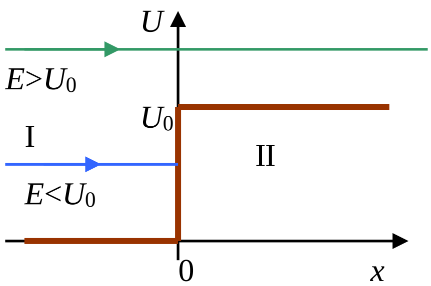

Рис. 4.2.

Этот вопрос проработать самостоятельно (см Сивухин Д.В., том 5, часть 1-ая. Атомная и ядерная физика §28). Прямоугольная ступенька является частным случаем прямоугольного барьера.

3.4.3. Прямоугольный потенциальный барьер

Рассмотрим прямоугольный потенциальный барьер (см рис. 4.3). Его потенциальная энергия запишется:

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ U_0, & 0 \le x \le a \\ 0, & x > 0 \end{cases} \qquad (3.4.3)$$

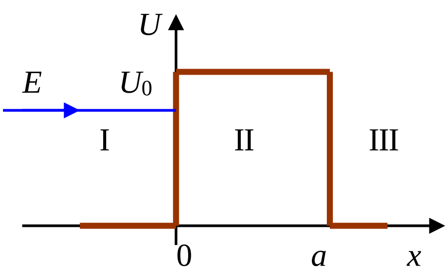

Рис. 4.3.

Вначале и в основном нас будет интересовать случай, когда падающие на барьер частицы имеют полную энергию меньшую, чем высота барьера: $E < U_0$. Итак, пусть на барьер налетает поток частиц из бесконечности с левой стороны ($x = -\infty$). Разобьем пространство на три части. Далее будем решать уравнение Шредингера последовательно в трех областях I, II и III (рис. 4.3).

В I и III областях имеем уравнение Шредингера, описывающее движение свободной частицы:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}=E\psi, \qquad \psi''+k^2\psi=0, \qquad k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \tag{3.4.4}$$

и его решения в этих областях записываются, соответственно:

I область $$\psi(x)=A exp(ikx)+B exp(-ikx) \tag{3.4.5}$$

III область $$\psi(x)=G exp(ikx)+F exp(-ikx) \tag{3.4.6}$$

Во II области имеем уравнение:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+U_0\psi=E\psi, \qquad \psi''-\alpha^2\psi=0, \qquad \alpha=\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(U_0-E)} \tag{3.4.7}$$

и при условии $E<U_0$ получаем следующее его решение:

II область $$\psi(x)=C exp(\alpha x)+D exp(-\alpha x) \tag{3.4.8}$$

Итак, волна, описываемая $exp(ikx)$, распространяется в положительном направлении оси x, а волна, описываемая $exp(-ikx)$, – в обратном направлении. В III области не будет волны, распространяющейся в обратном направлении оси x: $Fexp(-ikx)$, т.к. из области ($x=\infty$) нет потока частиц, идущего к барьеру.

Итак, полное решение можно записать в виде:

$$\psi(x)=\begin{cases} A exp(ikx)+B exp(-ikx) & x<0 \\ C exp(\alpha x)+D exp(-\alpha x) & 0\le x\le a \\ G exp(ikx) & x>a \end{cases} \tag{3.4.9}$$

Произведем сшивание волновых функций на границах барьера, поскольку полная волновая функция и ее первая производная должны быть непрерывны. Условия на границах барьера образуют систему уравнений для определения коэффициентов A, B, C, D и G:

При $x=0$ $$\begin{cases} A+B=C+D \\ ik(A-B)=\alpha(C-D) \end{cases}. \tag{3.4.10}$$

При $x=a$ $$\begin{cases} C exp(\alpha a)+D exp(-\alpha a)=G exp(ika) \\ \alpha(C exp(\alpha a)-D exp(-\alpha a))=ikG exp(ika) \end{cases}. \tag{3.4.11}$$

Введем коэффициенты *отражения* и *прохождения* как отношение плотностей потока вероятностей (2.6.8) (аналогично тому, как в оптике рассматривали плотности потока энергии для определения подобных коэффициентов):

$$\vec{j}=\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi\nabla\psi^*-\psi^*\nabla\psi\right). \tag{3.4.12}$$

В I области плотность потока вправо определяется через волну, распространяющуюся вдоль оси x: $\psi_1=A exp(ikx)$. Подставляя ее в (3.4.12), имеем:

$$j_1=\frac{i\hbar}{2m}\left(A^2 exp(ikx)(-ik)exp(-ikx)-A^2 exp(-ikx)(ik)exp(ikx)\right)=\frac{\hbar k}{m}A^2 \tag{3.4.13}$$

Плотность потока влево в I области определяется волной $\psi_2=B exp(-ikx)$:

$$j_2=\frac{i\hbar}{2m}ikB^2=-\frac{\hbar k}{m}B^2 \tag{3.4.14}$$

Коэффициент отражения определяют как отношение плотностей потоков:

$$R=\left|\frac{j_2}{j_1}\right|=\left|\frac{B}{A}\right|^2 \tag{3.4.15}$$

Коэффициент прохождения (поток вероятности прошедшей волны определяется волновой функцией $\psi=G exp(ik_3x)$, $k_3=k_1$) получаем аналогично:

$$T = \left|\frac{j_3}{j_1}\right| = \left|\frac{k_3 G^2}{k_1 A^2}\right| = \left|\frac{G}{A}\right|^2 \qquad (3.4.16)$$

Решая систему уравнений (3.4.10)-(3.4.11) и учитывая, что все коэффициенты в (3.4.9) выражаются через A, можно найти (см Приложение 1 в конце параграфа):

$$T = \frac{4\left(\frac{\alpha}{k}\right)^2}{\left(1+\alpha^2/k^2\right)^2 Sh^2\alpha a + 4\alpha^2/k^2} = \frac{1}{1+\frac{\left(1+\alpha^2/k^2\right)^2}{4\alpha^2/k^2}Sh^2\alpha a}, \qquad (3.4.17)$$

где гиперболический синус определяется:

$$Shx = \frac{e^x - e^{-x}}{2} \qquad (3.4.18)$$

При этом

$$\frac{\alpha}{k} = \sqrt{\frac{U_0 - E}{E}} = \sqrt{\frac{U_0}{E} - 1}. \qquad (3.4.19)$$

Откуда получаем выражение для коэффициента прохождения:

$$T = \frac{1}{1+\frac{U_0^2 Sh^2\alpha a}{4E(U_0 - E)}} \qquad (3.4.20)$$

Исследуем коэффициенты прохождения и отражения.

1) Коэффициент прохождения не равен нулю $T \neq 0$ при полной энергии частицы меньшей высоты потенциального барьера $E < U_0$. Это явление называется *туннельным эффектом*. Качественно волновая функция изображена на рис. 4.4. В классической физике ничего подобного нет, туннельная эффект – чисто квантовый эффект.

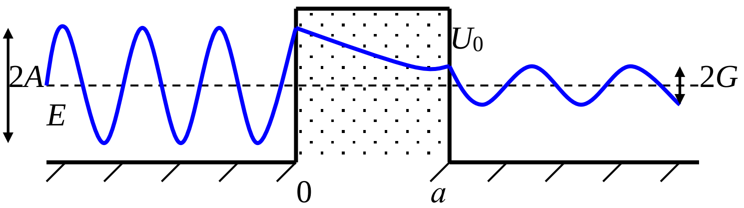

Рис. 4.4.

2) При условии $\alpha a >> 1$ можно получить следующее выражение для коэффициента прохождения T:

$$T \approx \frac{4\left(\alpha/k\right)^2 \cdot 2^2}{\left(1+\alpha^2/k^2\right)^2 exp(2\alpha a)} = \frac{16\left(\alpha/k\right)^2}{\left(1+\alpha^2/k^2\right)^2} exp\left(-\frac{2}{\hbar}a\sqrt{2m(U_0 - E)}\right) \qquad (3.4.21)$$

Т.е. коэффициент прохождения определяется экспонентой:

$$T \sim exp\left(-\frac{2}{\hbar}a\sqrt{2m(U_0 - E)}\right)$$

показатель которой зависит от разности между высотой барьера и полной энергии частицы. Чем выше эта разница, тем меньше коэффициент прохождения.

3) Коэффициент прохождения T стремится к 0 в следующих предельных случаях:

а) $a \to \infty$ (т.е. в случае потенциальной прямоугольной ступеньки)

б) $U_0 \to \infty$ (бесконечно высокий барьер)

в) $m \to \infty$ (тяжелая частица)

г) $\hbar \to 0$ (переход к классическому рассмотрению)

4) Коэффициент отражения определяется соотношением (3.4.15): $R = \left|\frac{B}{A}\right|^2$. Подставляя решения системы уравнений (3.4.10)- (3.4.11), получаем:

$$R = \frac{\frac{\left(k^2+\alpha^2\right)^2}{4k^2\alpha^2} Sh^2\alpha a}{1+\frac{\left(k^2+\alpha^2\right)^2}{4k^2\alpha^2} Sh^2\alpha a} = \frac{\frac{U_0^2 Sh^2\alpha a}{4E(U_0-E)}}{1+\frac{U_0^2 Sh^2\alpha a}{4E(U_0-E)}} \qquad (3.4.22)$$

5) Как и должно быть из закона сохранения потока вероятности, имеем:

$$R+T=1. \qquad (3.4.23)$$

Рассмотрим теперь кратко случай $E > U_0$.

При условии $E > U_0$ решение получается тем же путем, как и ранее, только в области II имеем решение, описывающее движение свободной частицы с волновым числом: $\alpha = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E-U_0)}$. В результате решения мы получаем те же формулы для коэффициентов прохождения и отражения, в которых только параметр "α" меняем на "$i\alpha$" (вследствие изменения знака под корнем в выражении (3.7.4)) и, соответственно, "Sh" на "$-iSin$":

$$T = \frac{4\left(\alpha/k\right)^2}{\left[1-\left(\alpha/k\right)^2\right]^2 Sin^2\alpha a + 4\left(\alpha/k\right)^2} = \frac{1}{1+\frac{\left[1-\left(\alpha/k\right)^2\right]^2}{4\left(\alpha/k\right)^2} Sin^2\alpha a} \qquad (3.4.24)$$

$$R = \frac{\left[1-\left(\alpha/k\right)^2\right]^2 Sin^2\alpha a}{\left[1-\left(\alpha/k\right)^2\right]^2 Sin^2\alpha a + 4\left(\alpha/k\right)^2} \qquad (3.4.25)$$

Таким образом, в общем случае даже при энергиях частицы выше высоты барьера мы получаем коэффициент отражения не равный нулю $R \neq 0$, а коэффициент прохождения $T < 1$. Итак, частица может отразиться от барьера и при энергии, превышающей величину барьера, $E > U_0$, когда по классической механике частица проходит с достоверностью над барьером.

Однако есть такие энергии частицы (характерные энергии), когда коэффициент отражения равен 0, а коэффициент прохождения равен 1. Эти энергии находятся из условия:

$$Sin\alpha a = 0 \quad \Rightarrow \quad \alpha a = n\pi \quad \Rightarrow \quad \alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2}\left(E-U_0\right)$$

$$E_n = U_0 + \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2 \qquad (3.4.26)$$

При таких энергиях частица пролетает над барьером с достоверностью и при квантовом рассмотрении.

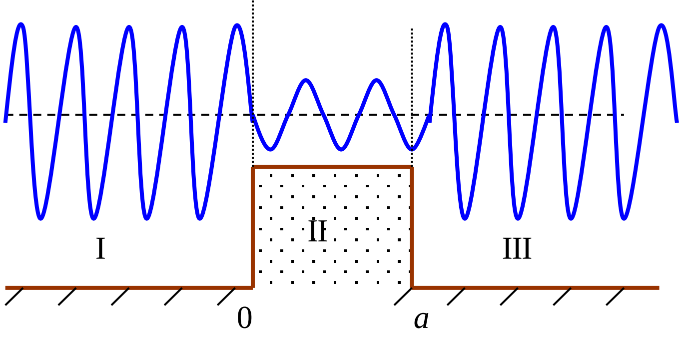

Рис. 4.5.

Заметим, что при этом целое число полуволн де Бройля укладывается на барьере, чему соответствует условие $\alpha a = n\pi$ (см рис. 4.5).

Примечание 1. Аналогичное решение для коэффициентов прохождения и отражения получаем для барьера в виде прямоугольной ямы (рис. 4.6), при этом в формулах меняется только "U_0" на "$-U_0$". Отметим, что и в этой задаче в общем случае коэффициент отражения не равен нулю, хотя по классическим представлениям частица проходит над ямой с достоверностью. Коэффициент прохождения обращается в единицу только для таких энергий, когда размер ямы соответствует целому числу полуволн де Бройля.

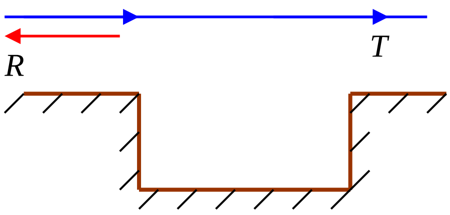

Рис. 4.6.

3.4.4. Барьер произвольной формы.

Если барьер $U = U(x)$ имеет произвольную форму, то задача о прохождении частицы усложняется, однако часто можно решить ее приближенно. Пусть $E = const$ и тогда равенство $E = U(x)$ определяет 2 точки a и b, где частица классически “входит” под барьер и “выходит” из барьера (см рис. 4.7). Сам барьер можно представить в виде суммы прямоугольных барьеров, причем каждый из них рассматривать отдельно как ранее.

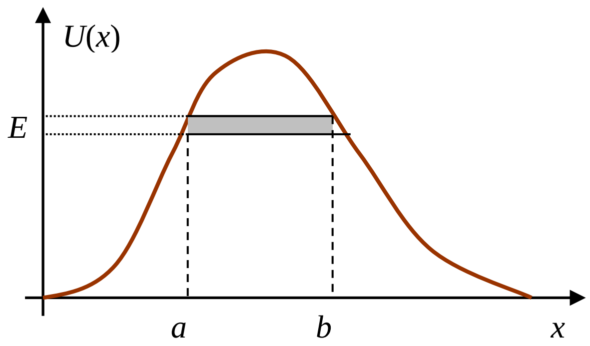

Рис. 4.7.

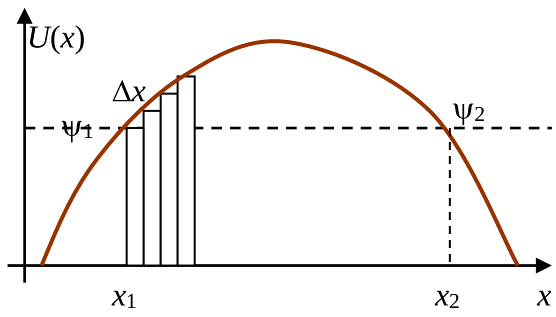

Рис. 4.8.

Приближенно задачу можно решить, если барьеры достаточно широкие, и при этом импульс $p(x)$ и соответствующая волна де Бройля $\lambda = 2\pi\hbar / p(x)$ медленно меняются на расстоянии ~ λ. То есть можно записать это условие математически:

$$\lambda\left|\frac{d\lambda}{dx}\right| << \lambda \qquad (3.4.27)$$

Соотношение (3.4.27) определяет условие применения, так называемого квазиклассического приближения.

В самом деле, воспользуемся описанием изменения волновой функции при распространении частицы в пространстве с постоянным потенциалом, а именно:

$$\psi(x) = \psi_0 e^{\frac{i}{\hbar}px}$$

где $p(x) = const$ (временной множитель $e^{\frac{i}{\hbar}Et}$ опустили, т.к. он не существенен для определения координатной зависимости).

Разбивая барьер на маленькие прямоугольные барьеры шириной Δx, как показано на рис. 4.8, можно считать, что на ширине Δx такого барьера $U(x) = const$ и импульс частицы не меняется $p(x) = \sqrt{2m(E-U)} \approx const$. Тогда можно записать последовательное приближенное изменение волновой функции при переходе от одного барьера к другому:

$$\psi(x+\Delta x) \approx \psi(x) e^{\frac{i}{\hbar}p(x)\Delta x}$$

$$\psi(x+2\Delta x) \approx \psi(x+\Delta x) e^{\frac{i}{\hbar}p(x+\Delta x)\Delta x}$$

$$\psi(x+3\Delta x) \approx \psi(x+2\Delta x) e^{\frac{i}{\hbar}p(x+2\Delta x)\Delta x}$$

и так далее

....

Тогда связь волновой функции на выходе из барьера с волновой функцией на входе записывается:

$$\psi_2 \approx \psi_1\, exp\left(\frac{i}{\hbar}\left[p(x)\Delta x + p(x+\Delta x)\Delta x + p(x+2\Delta x)\Delta x + ...\right]\right) = \psi_1\, exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2} p(x)dx\right) \quad (3.4.28)$$

Коэффициент прохождения через барьер произвольной формы приближенно равен:

$$T \approx \left|\frac{\psi_2}{\psi_1}\right|^2 \approx \left|exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2} p(x)dx\right)\right|^2 = \left|exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2m(U(x)-E)}dx\right)\right|^2$$

Здесь мы поменяли местами потенциальную и полную энергии частицы. Окончательно имеем:

$$T = T_0\, exp\left\{-\frac{2}{\hbar}\int_a^b \sqrt{2m(U(x)-E)}dx\right\} \quad (3.4.29)$$

Это выражение позволяет найти коэффициент прохождения через барьер произвольной формы в квазиклассическом приближении.

Приложение 1. Покажем, как получается одно из решений системы уравнений (3.4.10)-(3.4.11). В первой паре уравнений (3.4.10) сложим два уравнения, избавляясь от коэффициента B:

$$2A = -i\frac{\alpha}{k}(C-D) + C + D = C\left(1 - i\frac{\alpha}{k}\right) + D\left(1 + i\frac{\alpha}{k}\right)$$

Во второй паре уравнений (3.4.11) делим на α второе уравнение, затем складываем и вычитаем, получая следующие два соотношения:

$$2Ce^{\alpha a} = Ge^{ika}\left(1 + i\frac{k}{\alpha}\right)$$

$$2De^{-\alpha a} = Ge^{ika}\left(1 - i\frac{k}{\alpha}\right)$$

Выражая отсюда $2C$ и $2D$, подставим их в предыдущее уравнение:

$$4A = \left(1 - i\frac{\alpha}{k}\right)\left(1 + i\frac{\alpha}{k}\right)Ge^{ika-\alpha a} + \left(1 + i\frac{\alpha}{k}\right)\left(1 - i\frac{\alpha}{k}\right)Ge^{ika+\alpha a}$$

Преобразуем, раскрывая скобки и перегруппируя:

$$4A = 2Ge^{ika}\left(e^{\alpha a} + e^{-\alpha a}\right) + iGe^{ika}\left(\frac{\alpha}{k} - \frac{k}{\alpha}\right)\left(e^{\alpha a} - e^{-\alpha a}\right)$$

Введем гиперболический косинус и гиперболический синус:

$$Ch\alpha a = \frac{1}{2}\left(e^{\alpha a} + e^{-\alpha a}\right), \quad Sh\alpha a = \frac{1}{2}\left(e^{\alpha a} - e^{-\alpha a}\right)$$

Для них выполняется теорема Пифагора:

$$Ch^2\alpha a - Sh^2\alpha a = 1$$

Тогда получаем для $2A$:

$$2A = 2Ge^{ika}Ch\alpha a + iGe^{ika}\left(\frac{\alpha}{k} - \frac{k}{\alpha}\right)Sh\alpha a$$

Возведем по модулю в квадрат:

$$4A^2 = G^2\left[4Ch^2\alpha a + \left(\frac{\alpha}{k} - \frac{k}{\alpha}\right)^2 Sh^2\alpha a\right]$$

Откуда раскрывая скобки и учитывая теорему Пифагора, получаем для отношения квадратов:

$$\frac{G^2}{A^2}=\frac{4}{4+\left(\frac{\alpha}{k}+\frac{k}{\alpha}\right)^2 Sh^2\alpha a}=\frac{4\frac{\alpha^2}{k^2}}{\left(1+\frac{\alpha^2}{k^2}\right)^2 Sh^2\alpha a+4\frac{\alpha^2}{k^2}}$$

что совпадает с (3.4.24).
