1.3. ПОТЕНЦИАЛЬНЫЕ БАРЬЕРЫ ПОЛУБЕСКОНЕЧНОЙ ТОЛЩИНЫ

Цель лекции: ознакомление с потенциальным барьером полубесконечной толщины для микрочастиц.

Потенциальные барьеры и ямы для микрочастиц возникают, например, вследствие электрического взаимодействия электронов с ионами решетки в твердом теле, на границах раздела тел. Изменение потенциальной энергии частицы в зависимости от ее координат представляет собой потенциальный рельеф для этой частицы в заданном объеме. В кристаллах наблюдается периодический потенциальный рельеф, который в простейшем случае можно представить в виде совокупности одномерных прямоугольных барьеров, разделенных прямоугольными ямами.

Прямоугольный барьер полубесконечной толщины. Пусть в области A микрочастица имеет потенциальную энергию, равную нулю, а в области B — равную u.

Запишем одномерное амплитудное стационарное уравнение Шредингера:

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-u)\Psi=0.$$

Длина волны де Бройля для электрона

$$\lambda=\frac{h}{p}=\frac{h}{mv}\to\nu=\frac{h}{\lambda m},$$

где m, v — масса и скорость электрона.

Кинетическая энергия электрона

$$E_k=\frac{mv^2}{2}=\frac{mh^2}{2\lambda^2m^2}=\frac{h^2}{2m\lambda^2}.$$

Введем волновое число $k=\frac{2\pi}{\lambda}$, запишем

$$\lambda=\frac{2\pi}{k},$$

откуда

$$E_k = E - u = \frac{h^2 k^2}{2m(2\pi)^2} = \frac{h^2 k^2}{8\pi^2 m},$$

где $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1{,}05 \cdot 10^{-34}$ Дж · с.

Тогда

$$E - u = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \tag{1.6}$$

Выразив из формулы (1.6) k, получим

$$k^2 = \frac{(E-u)2m}{\hbar^2} \to k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE_k}.$$

Следовательно, уравнение Шредингера можно записать в виде

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + k^2 \Psi = 0.$$

В области A: $E_k = E$, $u = 0$ (E — полная энергия частицы), $\Psi = \Psi_1$; в области B: $E_k = E - u$, $\Psi = \Psi_2$.

Запишем уравнения Шредингера для областей A и B:

$$A\colon \frac{\partial^2 \psi_1}{\partial x^2} + k_1^2 \psi_1 = 0; \tag{1.7}$$

$$B\colon \frac{\partial^2 \psi_2}{\partial x^2} + k_2^2 \psi_2 = 0, \tag{1.8}$$

где

$$k_1 = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}; \quad k_2 = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E-u)}.$$

Общие решения уравнений (1.7) и (1.8) можно записать в виде

$$\Psi_1 = A_1 \exp(ik_1 x) + B_1 \exp(-ik_1 x);$$
$$\Psi_2 = A_2 \exp(ik_2 x) + B_2 \exp(-ik_2 x),$$

где A_1 — амплитуда падающей волны; B_1 — амплитуда отраженной волны в области A; A_2 — амплитуда волны, распространяющейся в области B в направлении x; B_2 — амплитуда отраженной волны в области B; так как область B полубесконечна, то отраженной волны нет и $B_2 = 0$.

Вероятность нахождения микрочастицы в том или ином месте пространства пропорциональна квадрату амплитуды волны де Бройля, тогда

$$k = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2},$$

отношение квадрата амплитуды отраженной волны к квадрату амплитуды падающей волны называется коэффициентом отражения микрочастицы от барьера. Отношение квадрата амплитуды прошедшей волны к квадрату амплитуды падающей волны называется коэффициентом прозрачности:

$$D = \frac{|A_2|^2}{|A_1|^2}.$$

Можно показать, что

$$R = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2; \tag{1.9}$$

$$D = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}. \tag{1.10}$$

Если $E > u$, то R и D определяются из формул (1.9) и (1.10) и $R + D = 1$, т. е. в данном случае в отличие от классической частицы наблюдается отражение. Коэффициент отражения R будет тем больше, чем меньше k_2 и, следовательно, чем меньше разность $E - u$.

Если $E = u$, то из уравнения (1.8) следует, что $k_2 = 0$, и тогда $R = 1$, а $D = 0$, т. е. наблюдается полное отражение волны.

Если $E < u$, то k_2 (см. (1.8)) является мнимой величиной.

Обозначим вещественную величину

$$k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(u - E)},$$

тогда $k_2 = ik$,

$$R = \left|\frac{k_1 - ik}{k_1 + ik}\right|^2 = \frac{(k_1 - ik)(k_1 + ik)}{(k_1 + ik)(k_1 - ik)} = 1$$

(см. определение комплексно-сопряженных чисел);

$$D = 1 - R = 0.$$

Однако в этом случае

$$\Psi_2 = A_2 e^{ik_2 x} = A_2 e^{-kx}.$$

Вероятность обнаружения частицы в области B в зависимости от значения координат будет равна:

$$\omega = \Psi_2 \Psi_2^* = |\Psi_2|^2 = |A_2|^2 e^{-2kx} = |A_2|^2 e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(u-E)}x}. \qquad (1.11)$$

Произведение комплексно-сопряженных чисел есть число действительное и равное квадрату модуля каждого из них.

Комплексно-сопряженными числами называются два числа, действительные части которых равны, а мнимые различаются только знаками.

Выражение (1.11), показывающее, что вероятность обнаружения частицы в области B отлична от нуля, не противоречит, однако, $D = 1 - R$, показывающему, что падающая волна полностью отражается от барьера. Это обусловлено тем, что некоторая часть частиц из падающего потока проникает в область B, а затем выходит в область A.

Тесты к лекции 1.3

1. ***В результате чего возникают потенциальные барьеры и ямы для микрочастиц в твердом теле?***

а) в результате электрического взаимодействия электронов с ионами решетки в твердом теле, на границах раздела тел;

б) в результате нагрева твердого тела до температуры плавления;

в) в результате нагрева твердого тела до температуры Дебая.

2. ***Какой формулой определяется волновое число?***

а) $k = \frac{2\pi}{\lambda}$;

б) $k = 2\omega\pi$;

в) $k = 2\pi\delta$.

3. ***Что называется коэффициентом отражения микрочастицы от барьера?***

а) отношение квадрата амплитуды отраженной волны к квадрату амплитуды падающей волны;

б) отношение амплитуды отраженной волны к амплитуде падающей волны;

в) отношение модуля амплитуды отраженной волны к модулю амплитуды падающей волны.

4. ***Что называется коэффициентом прозрачности при прохождении микрочастицы через барьер?***

а) отношение квадрата амплитуды прошедшей волны к квадрату амплитуды падающей волны;

б) отношение амплитуды прошедшей волны к амплитуде падающей волны;

в) отношение модуля амплитуды прошедшей волны к модулю амплитуды падающей волны.