1.3 Эффект Рамзауэра

Вычисление прозрачности одномерной потенциальной ямы

Элементарные сведения о понятии волновой функции и уравнении Шредингера

Распределение вероятности обнаружить частицу в какой-то области пространства dV описывается в квантовой физике комплексной волновой функцией $\psi(\vec{r})$: $d\,w = |\psi|^2 dV$.

Волновая функция стационарного состояния (состояния с определённой энергией E) подчиняется уравнению Шредингера $-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + U(\vec{r})\psi = E\psi$, где $U(\vec{r})$ – потенциальная энергия частицы.

От волновой функции требуются:

1. непрерывность, так как скачок волновой функции будет соответствовать резкому нефизическому скачку в распределении вероятности
2. гладкость (за исключением нефизического, но полезного случая бесконечно высокой стенки), так как скачок производной соответсвует нефизическому скачку среднего импульса $\langle\vec{p}\rangle = -i\hbar\int\psi^*\vec{\nabla}\psi\,dV$ на границе

Нормировка волновой функции $\int\psi^*\psi\,dV = 1$, выражающая математическое требование суммы всех вероятностей, равной 1, применяется при финитном движении частицы (волновая функция отлична от нуля в ограниченной области пространства).

Для свободной частицы ($U=0$) уравнение Шредингера имеет решение вида плоской волны $\psi = C\,e^{i\vec{k}\vec{r}}$. Для нормировки такого решения удобно выразить поток частиц (число частиц, пересекающих площадку dS за время dt :

$$j = \frac{dN}{dS\,dt} = \frac{|\psi|^2 dV}{dS\,dt} = \frac{|\psi|^2 dS\frac{p}{m}dt}{dS\,dt} = \frac{\hbar k}{m}|\psi|^2 \quad .$$

Решение одномерного уравнения Шредингера для частицы, налетающей на потенциальную яму

Рассмотрим одномерную задачу с потенциалом

$$U(x) = \begin{cases} 0, x<0 \\ -U_{0,}0<x<l \\ 0, x>l \end{cases} \quad .$$

Такой потенциал называют потенциальной ямой глубиной U_0 и шириной l .

Пусть на такую яму из минус бесконечности падает поток частиц. Определим долю частиц, прошедших через яму.

Одномерное уравнение Шредингера $-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''+(U-E)\psi=0$ в областях $x<0$ и $x>l$ (где $U=0$) имеет решение вида $\psi=Ae^{ik_1x}+Be^{-ik_1x}$, где $k_1^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$. В области $0<x<l$ (где $U=-U_0$) $\psi=Ae^{ik_2x}+Be^{-ik_2x}$, где $k_2^2=\frac{2m(E+U_0)}{\hbar^2}$.

Слагаемые с положительным знаком в экспоненте соответствуют волне, распространяющейся слева направо. Слагаемые с отрицательным знаком — волне, распространяющейся справа налево.

В силу произвольности выбора падающего потока частиц, можно положить одну из констант равной произвольному числу. Удобно таким образом отнормировать падающий поток. Кроме того, после ямы имеет физический смысл только решение, распространяющееся слева направо (не от чего отражаться обратной волне).

Таким образом, решения для волновой функции надо искать в виде:

$$\psi=\begin{cases} e^{ik_1x}+Ae^{-ik_1x}, x<0 \\ C_1e^{ik_2x}+C_2e^{-ik_2x}, 0<x<l \\ Be^{ik_1x}, x>l \end{cases} .$$

Требования непрерывности и гладкости при $x=0$ и $x=l$ приводят к системе линейных уравнений:

$$\begin{gathered} 1+A=C_1+C_2 \\ C_1e^{ik_2l}+C_2e^{-ik_2l}=Be^{ik_1l} \\ k_1(1-A)=k_2(C_1-C_2) \\ k_2\left(C_1e^{ik_2l}-C_2e^{-ik_2l}\right)=k_1Be^{ik_1l} \end{gathered} .$$

Система позволяет найти все коэффициенты, но для нахождения кожффициента прохождения (или коэффициента отражения) достаточно найти амплитуду прошедшей (отражённой) волны B (A). После прямолинейных преобразований получаем:

$$B=\frac{4k_1k_2e^{-ik_1l}}{(k_1+k_2)^2e^{-ik_2l}-(k_1-k_2)^2e^{ik_2l}} .$$

Коэффициент прохождения над ямой определяется отношением потоков падающих и прошедших частиц, то есть[1]:

$$D=|B|^2=BB^*=\frac{16k_1^2k_2^2}{(k_1+k_2)^4+(k_1-k_2)^4-(k_1+k_2)^2(k_1-k_2)^2\left(e^{2ik_2l}+e^{-2ik_2l}\right)} .$$

После арифметических преобразований и использования формулы косинуса двойного угла получим окончательно:

1 Внимание — здесь неявно использован тот факт, что волновой вектор одинаков по величине слева и справа от ямы, в общем случае возникло бы ещё отношение квадратов волновых векторов.

$$D=\frac{16k_1^2k_2^2}{16k_1^2k_2^2+4(k_1^2-k_2^2)^2\sin^2(k_2 l)}=\frac{1}{1+\frac{1}{4}\left(\frac{k_1}{k_2}-\frac{k_2}{k_1}\right)^2\sin^2(k_2 l)}=$$

$$=\frac{1}{1+\frac{1}{4}\left(\sqrt{\frac{E}{E+U_0}}-\sqrt{\frac{E+U_0}{E}}\right)^2\sin^2(k_2 l)}=\frac{1}{1+\frac{1}{4}\left(\sqrt{\frac{E}{E+U_0}}-\sqrt{\frac{E+U_0}{E}}\right)^2\sin^2\left(\sqrt{E+U_0}\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}}l\right)}.$$

Если энергии выражать в электронвольтах, а длину барьера в ангстремах, то для электрона

$$D=\frac{1}{1+\frac{1}{4}\left(\sqrt{\frac{E}{E+U_0}}-\sqrt{\frac{E+U_0}{E}}\right)^2\sin^2\left(\sqrt{E+U_0}[\text{эВ}]\frac{l[\text{Å}]}{1.95}\right)}.$$

Анализ зависимости коэффициента прохождения от параметров задачи

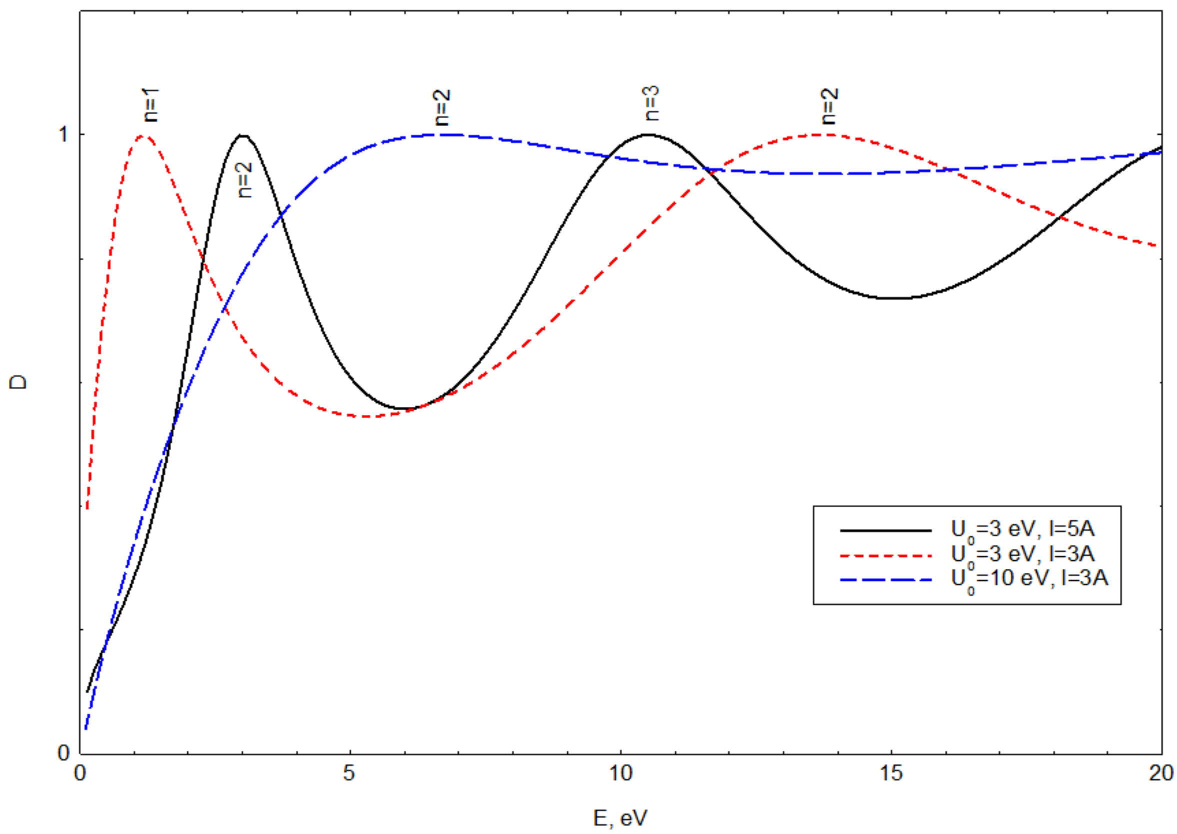

Рисунок 1: Зависимость коэффициента пропускания D от энергии налетающего электрона для различных параметров задачи

Примеры вычисленных зависимостей $D(E)$ показаны на рисунке 1. Условие «просветления» ($D=1$): $\sqrt{E+U_0}[\text{эВ}]\frac{l[\text{Å}]}{1.95}=\pi n$, условие «затемнения» (где наблюдается минимум D) $\sqrt{E+U_0}[\text{эВ}]\frac{l[\text{Å}]}{1.95}=\pi n+\frac{\pi}{2}$.

При наблюдении последовательных «светлого» и «тёмного» участков ВАХ при энергиях электронов $E_{light}<E_{dark}$, строго говоря, невозможно независимо определить номер

наблюдаемого экстремума n. Номер первого наблюдаемого просветления зависит от соотношения чисел: так как $E>0$, а в атоме можно ожидать $U_0 \sim 10$ эВ (порядка энергии ионизации) и $l \sim 1\,\mathring{A}$ (типичный размер атома), то можно ожидать, что для первого просветления $n=1,2,3$ (действительно, рисунок 1 показывает, что при вполне разумных значениях параметров первый наблюдаемый пик «просветления» может соответствовать $n=2$). Для «тёмного» экстремума с $n=0$, который мог бы наблюдаться при самой маленькой энергии, может легко оказаться, что $\sqrt{U_0}\frac{l}{1.95}>\frac{\pi}{2}$, то есть при положительной энергии электрона это равенство не выполнить.

Возводя в квадрат и вычитая условия «просветления» и «затемнения» можно исключить глубину ямы:

$(E_{dark}-E_{light})\left(\frac{l}{1.95}\right)^2=\frac{\pi^2}{4}+\pi^2 n$, где энергии выражены в электронвольтах, а ширина ямы — в ангстремах.

Разделив условия «просветления» и «затемнения» можно исключить размер ямы:

$\frac{E_{dark}+U_0}{E_{light}+U_0}=\left(1+\frac{1}{2n}\right)^2$ и выразить таким образом глубину ямы.

Из рисунка 1 видно, что максимумы D («просветления») выражены гораздо лучше, чем минимумы («затемнения»). Для прояснения этого вопроса можно построить трёхмерный график на плоскости (E, l) для зафиксированного значения U_0 (рисунок 2).

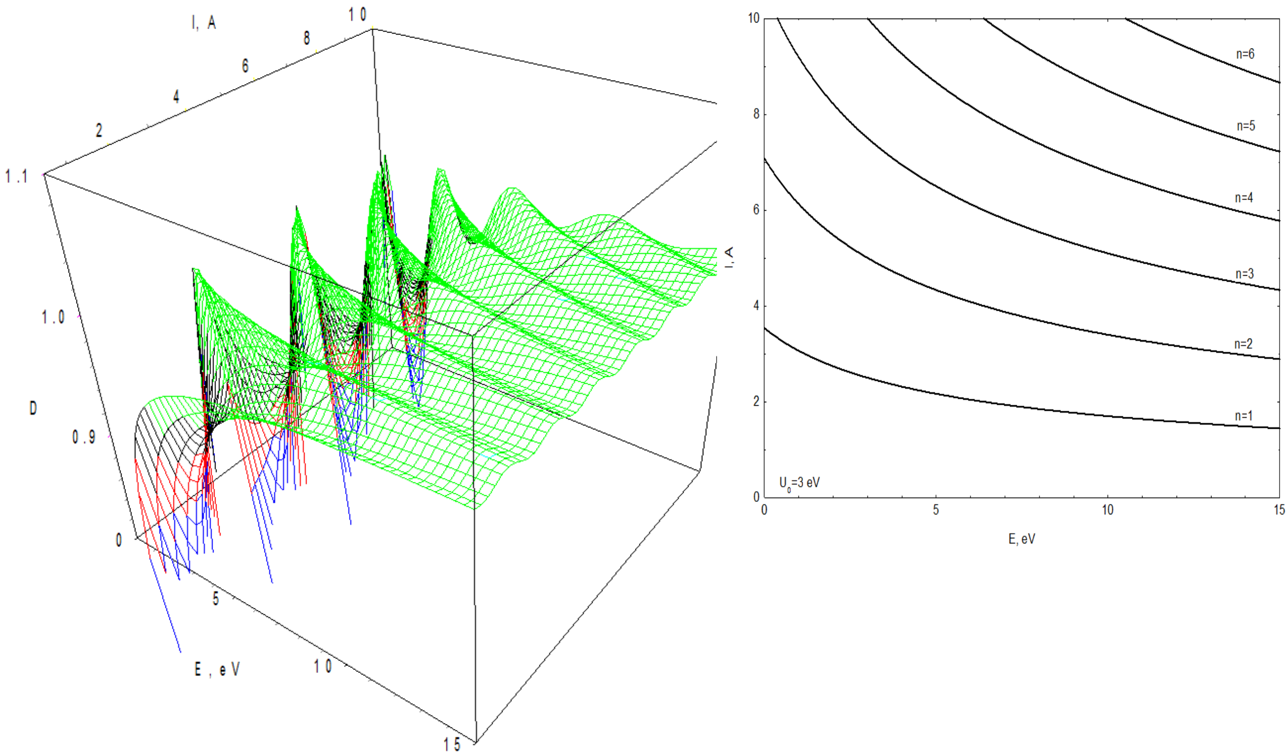

Рисунок 2 Слева: Зависимость D(E, l) для U_0=3 эВ. Справа: положение максимумов коэффициента прохождения D=1 на плоскости (E, l) для U_0=3 эВ.

Из рисунка 2 видна особенность функции $D(E, l)$: так как в условиях эксперимента мы сканируем по энергии электронов, то после первого, относительно острого, «светлого» экстремума сечение поверхности $D(E, l)$ плоскостью $l=const$ идёт почти вдоль «ложбины» в рельефе функции $D(E, l)$ — так что минимум получается очень широким.