### Лекція 4 Лінійний гармонічний осцилятор

***Класичний осцилятор*.** У класичній механіці лінійним гармонічним осцилятором називають матеріальну точку, що здійснює вільні гармонічні коливання вздовж однієї осі (лінії), тобто, рухається за законом:

*x*  *xm* cos*t*  ** .

Цей рух здійснюється під дією сили

2

або

d2 *x*

*Fx m* d*t* 2



 *m*

*xm* cos*t*  ** ,

|  |  |
| --- | --- |
| *F*  *kx*, *k*  *m*2.*x* | (4.0) |

Така сила є консервативною й утворює потенціальне поле

*U*  *x*   *Fx* d *x* , яке визначається формулою

|  |  |
| --- | --- |
| 2*U* (*x*)  *kx*2 | (4.1) |

і на графіку зображується параболою (рис. 4.1). Тому поле виду (4.1) називають параболічним або осциляторним полем.

–*x*m

*U*

*E*

*x*m X

### Рис. 4.1

Повна енергія осцилятора зберігається ( *E*  const ) і на рис. 4.1 зображується горизонтальним відрізком. Координати точок його перетину з

параболою *U*  *x* визначають амплітуду коливань осцилятора: *A*  *x*m . При

цьому повна енергія *Е* і амплітуда *А* залежать тільки від початкових умов (початкового відхилення осцилятора від положення рівноваги або наданої йому початкової швидкості) і можуть бути якими завгодно.

Відповідно до виразу (4.1), частота осцилятора ** визначається силовою константою поля *k* та масою осцилятора *m*:

|  |  |
| --- | --- |
| **  *k* .*m* | (4.2) |

Враховуючи цю формулу, вираз потенціальної енергії осцилятора (4.1) можна записати у вигляді:

|  |  |
| --- | --- |
| *U* (*x*)  *m x*2 2.2 | (4.3) |

***Квантовий осцилятор. Енергетичний спектр*.** Для мікрочастинок сила не є визначеною, тому в квантовій механіці лінійний гармонічний осцилятор означають як частинку, що знаходиться в параболічному силовому полі (4.23). Відповідно, рівняння Шрьодінгера для лінійного осцилятора має вигляд:



|  |  |
| --- | --- |
| d2**  2*m*   *m*2 *x*2  d *x*2 2  *E* 2 ** 0 .  | (4.4) |

Розв’язування цього рівняння та його розв’язки  хвильові функції квантового осцилятора  є досить складними. Але й без строгого математичного дослідження можна передбачити, що стаціонарні стани квантового осцилятора є квантованими. Справді, при віддаленні від положення рівноваги потенціальна енергія осцилятора зростає необмежено, тож він ні за яких умов не може необмежено віддалитися від положення

рівноваги

*x*  0 . Тож осцилятор можна розглядати як частинку в

потенціальному ящику з параболічними стінками. Тому його стани мають бути квантованими ..

Математика підтверджує такий прогноз: однозначні й неперервні

розв’язки рівняння (4.4)  хвильові функції осцилятора **  *x*  існують

лише при окремих значеннях параметра *Е*, що утворюють дискретний енергетичний спектр осцилятора відповідно до умови:

|  |  |
| --- | --- |
| *E*  **  1  **, **  0, 1, 2, ...,**  2   | (4.5) |

де **  квантове число осцилятора, або *коливальне квантове число*, а

*k* / *m*

величина

**  по аналогії з класичним осцилятором називається

циклічною частотою квантового осцилятора.

На рис. 4.4а показана картина енергетичних рівнів, яка ілюструє типові риси та деякі особливості енергетичного спектра квантового гармонічного осцилятора. Зокрема, вираз (4.5) показує, що осцилятор, як і частинка в прямокутному ящику, не може перебувати у стані спокою. Мінімальна енергія його коливань (енергія основного стану) дорівнює



|  |  |
| --- | --- |
| *E*  1 **.0 2 | (4.5*а*) |

Такими квантовими осциляторами є атоми в твердих тілах і рідинах, оскільки їхній тепловий рух являє собою малі коливання навколо положень рівноваги. Отже навіть при температурі *Т* = 0 К рух атомів не припиняється –

вони здійснюють так звані «нульові коливання» з енергією

*E*0 . Але атоми не

можуть передавати цю енергію один одному, тому квантові нульові коливання не мають нічого спільного з тепловим рухом атомів і не суперечать поняттю абсолютного нуля температури, так само як не суперечить йому рух електронів всередині атомів.

Енергетичні рівні збуджених станів осцилятора, які можна записати у вигляді

*E*  *E*0  *n*

**, *n*  1, 2, ,

є еквідистантними  вони розташовані в енергетичній шкалі на однаковій відстані (рис. 4.4а)

|  |  |
| --- | --- |
| *E*  *E* 1  *E*  **. | (4.6) |

5

*Е*



** 2

3 ** 2

** 2

2

1

0

**2

***а*) *б*)**

### Рис. 4.4

Отже, при переході гармонічного осцилятора з будь-якого енергетичного рівня на нижчий сусідній рівень, згідно із законом збереження енергії, випромінюється порція (квант) енергії ** . Це пояснює квантову гіпотезу Планка та правило частот Бора.

Теорія і дослід показують, що можливі тільки такі зміни стану осцилятора, при яких коливальне квантове число змінюється на одиницю:

**  1.

Згідно з цим “правилом відбору”, можливі переходи лише між сусідніми енергетичними рівнями осцилятора, і згідно з (4.6), атоми твердого тіла мали б обмінюватися квантами енергії однієї єдиної частоти. Але насправді так відбувається тільки при дуже низьких температурах. У загальному ж випадку в спектрах коливань атомів присутні цілі смуги близьких частот. Це пов’язано з ангармонізмом – відхиленням взаємодії між атомами від гармонічного закону (4.1) при підвищених температурах. Слід зазначити, що величина квантів коливальної енергії набагато менша, ніж енергія, що випромінюється чи поглинаються при переходах електронів між рівнями в атомах. Тому частоти коливальних переходів атомів лежать у далекій інфрачервоній області спектра.

Атоми здійснюють коливання не тільки в конденсованій речовині, а і в окремих молекулах. Тож при зміні стану молекули відбувається не тільки перехід електронів в атомах з одних електронних рівнів на інші, а й перехід самих атомів із одних коливальних рівнів на інші. Через це при переходах електронів у молекулах між заданими двома рівнями випромінюються (чи поглинаються) фотони не з однією частотою, а з цілою низкою близьких частот, які відповідають переходам атомів між різними коливальними

рівнями. Тому молекулярні спектри є не лінійчастими, як атомарні, а смугастими.

Принагідно зазначимо, що експериментальні дослідження молекулярних спектрів не лише підтверджують квантову теорію осцилятора, а й дають цінну інформацію про взаємодію та розташування атомів у молекулах.

***Хвильові функції*.** Із рівняння (4.4) можна отримати аналітичні вирази

хвильових функцій гармонічного осцилятора **  *x* , і визначити розподіл

ймовірностей

**  *x*  2

знаходження осцилятора в різних точках простору для

різних квантових станів.

Для перших трьох станів (**  0,1, 2) графіки

**  *x*  2

показано на

рис. 4.4б. Загалом вони нагадують аналогічні графіки рис. 4.2б для частинки в ящику з вертикальними стінками. Зокрема, в області руху існують точки з максимальною імовірністю знаходження осцилятора та «заборонені точки», в яких осцилятор виявити неможливо. Проте є й істотна відміна: графіки

**  *x*  2

виходять за межі графіка *U*(*х*), що означає можливість перебування

осцилятора в точках з координатами *x*  *x*m . У таких точках *Е* < *U*, що дає

для кінетичної енергії неможливі значення  *p*2 2*m*  *E*  *U*  0 . Але цей парадокс пов’язаний із принципом невизначеності і є удаваним. Дійсно, кінетична енергія *К* визначається імпульсом, а потенціальна *U* – координатами, тобто величинами, що одночасно на можуть бути точно визначеними (див. лекція 3, п. 3.4). Тому поділ повної енергії *Е* = *К* + *U* на кінетичну та потенціальну є певною мірою умовним. При цьому, як доводять розрахунки, у “забороненій зоні” квантовомеханічна невизначеність

кінетичної енергії осцилятора *K* ніде не перевищує «дефіцит» *U*  *E* . Тому

можливість виходу осцилятора в класично заборонену зону означає від’ємність його кінетичної енергії.

*x*  *x*m

зовсім не

### Тунельний ефект

***Бар’єри*.** Якщо на шляху частинки трапляється силове поле, що перешкоджає її рухові, то таке поле називають *потенціальним бар’єром*.

*E E*

**v**

X

*U*

2

*U*0

1

X

*x*0 0

### Рис. 4.5

*x*п *x*0 *d*

***б*)**

Наприклад, гірка на шляху кульки, що вільно рухається по горизонтальній поверхні (рис. 4.5*а*), створює потенціальний бар’єр, показаний на рис. 4.5*б* графіком залежності *U*(*х*) потенціальної енергії кульки

від координати. Бар’єр характеризується *висотою U* 0

(максимальною

величиною потенціальної енергії) та шириною *d* (розміром області, в якій існує силове поле21)

При розгляді руху частинки в напрямку бар’єра виникає природнє запитання – чи подолає вона бар’єр і буде продовжувати рух у тому ж напрямку, чи ні? Для класичної частинки відповідь є однозначною й залежить від співвідношення між повною енергією частинки та висотою бар’єра. При русі частинки в потенціальному полі повна енергія, що

складається з кінетичної та потенціальної, зберігається: *E*  *K* *U*  const .

Тому, якщо

*E*  *U*0

(горизонтальна лінія 1 на рис. 4.5*б*), то частинка

*відіб’ється* від бар’єра, тобто дістанеться тільки точки

*x*  *x*п , де

*U*  *E* i

*K*  0 , і почне рухатись у зворотному напрямі. Якщо ж

*E*  *U*0

(лінія 2), то навіть при

*x*  *x*0

(на вершині гірки) кінетична енергія кульки

*K*  *E*  *U*0  0 . Тож при

*E*  *U*0

кулька обов’язково подолає бар’єр і

продовжуватиме рухатися далі. В окремому випадку

*E*  *U*0

в точці

*x*  *x*0

кінетична енергія

*K*  0 , тобто кулька дістанеться вершини і зупиниться.

Отже, формально вона подолає бар’єр, бо не буде відкинута назад. Але рівновага кульки в точці максимуму потенціальної енергії (на вершині гірки) є нестійкою, і в дійсності вона неконтрольовано скотиться в той чи інший бік. Тому цей випадок не являє інтересу.

.

*U*

1 2

*U*0

X

0

### Рис. 4.6

Розглянемо тепер рух квантової частинки за наявності потенціального бар’єра. Для цього треба скласти та розв’язати рівняння Шрьодінгера (4.4). Аби максимально спростити математику, розглянемо бар’єр у вигляді прямокутної сходинки (рис. 4.6). У такому ідеалізованому полі потенціальну

енергію в усьому просторі неможливо виразити аналітично, тобто якоюсь

однією функцією *U*  *x* . Тому рух частинки до бар’єра (область 1, *х* < 0) і в

області бар’єра (область 2, кожної області:

*x*  0 ) описують окремими рівняннями (4.5) для

|  |  |
| --- | --- |
| *область*1: **  *k* 2**  0, *k*  2*mE* ;1 1 1 1*область* 2 : **   *k* 2**  0, *k*  2*m*(*E* *U* ) .2 2 2 2 0 | (4.6) |

При цьому, позаяк *ψ*1(*х*) і *ψ*2(*х*) є “половинками” хвильової функції тієї самої частинки, вони на межі областей (*х* = 0) повинні «зшиватися» – гладко переходити одна в одну, тобто задовольняти умови



|  |  |
| --- | --- |
| **1(0) ** 2 (0); **1(0) ** 2 (0). | (4.7) |

Із математики відомо, що загальні розв’язки рівнянь (4.6) мають вигляд

|  |  |
| --- | --- |
| **  *A* e*ik*1*x*  *B* e*ik*1*x* ,1 1 1**  *A* e*ik*2 *x*  *B* e*ik*2 *x* .2 2 2 | (4.8) |

Фізичний зміст цих розв’язків стає зрозумілим, якщо записати вираз

повної хвильової функції  *x*,*t*  , згідно з формулою (4.2):

 *x*,*t*   *A*e*i*(*t**kx*)  *B* e*i*(*t**kx*) .

Така функція описує сукупність двох хвиль, які поширюються у протилежних напрямках осі Х. Отже у виразах (4.28) перший доданок

функції **1

відповідає рухові частинки у напрямку бар’єра, а другий – її

рухові у зворотньому напрямку після відбивання від стінки бар’єра. Так само

перший доданок у ** 2

відповідає рухові частинки в області бар’єра після

подолання стінки. А от другого доданку в

** 2 , себто зворотньої хвилі, не

може бути, бо далі ніяких перешкод на шляху частинки немає. Тому

*B*2  0 , і

** 2  *A*2

e*ik*2 *x* .

Суттєво також, що реально прослідкувати за окремою частинкою в потоці, що падає на бар’єр, неможливо. Можна говорити лише про коефіцієнти відбивання та проходження  відсотки частинок, які відбиваються від бар’єра та долають його. Ці коефіцієнти визначаються

відносними амплітудами хвильових функцій розв’язки (4.28) можна подати, як

*b*1  *B*1 *A*1

і *a*2  *A*2

*A*1 . Відтак

|  |  |
| --- | --- |
| **  e*ik*1*x*  *b* e*ik*1*x* ,1 1**  *a* e*ik*2 *x* .2 2 | (4.8*а*) |

Накладаючи на ці функції умови «зшивання» (4.7), визначимо відносні амплітуди:

|  |  |
| --- | --- |
| 1  *b*1  *a*2 ,  *a*  2*k*1 , *b*  *k*1  *k*2 .*k* (1  *b* )  *k a* ; 2 *k*  *k* 1 *k*  *k*1 1 2 2 1 2 1 2 | (4.9) |

Ці вирази дозволяють аналізувати поведінку потоку частинок, що

налітають на бар’єр, у залежності від значень

*k*1 і

*k*2 (формули (4.6)), тобто

від енергії частинок *Е* та висоти бар’єра

*U* 0 . Зосередимося лише на випадку

*E*  *U*0 . За такої умови величина записати, як

*k*2 є уявною. В такому разі її доцільно

|  |  |
| --- | --- |
| 1*k*2  *ik*, де *k*  2*m*(*U*0  *E*), *i*  1. | (4.10) |

Тоді амплітуда *b*1 у виразах (4.29) дорівнює:

*b*  *k*1  *ik* .

1

При цьому ймовірність відбивання

*k*1  *ik*

*b* e*ik x* 2  *b* e*ik x*  *b*\* e*ik x*  *bb*\*  *k*1  *ik*  *k*1  *ik*

1.

1 1 1

1 1 1 1 1

*k*  *ik k*

* *ik*

1 1

Отже, всі частинки, що налітають на бар’єр, відбиваються від нього.

Оскільки

*E*  *U*0 , такий результат є цілком очікуваним. Але при цьому, згідно

з виразами (4.6а) і (4.30), **

2  *a*2

e*kx* , де *k* – дійсне число. Тому

|  |  |
| --- | --- |
| ** 2  *a* 2  e2*kx*  0.2 2 | (4.11) |

Отже, існує ймовірність проникнення частинки в заборонену в класичній механіці область “під бар’єром”. Пояснення цього суто квантового феномена таке саме, як і у випадку квантового осцилятора.

***Тунельний ефект*.** Як випливає з (4.11), імовірність заглиблення частинки під бар’єр стрімко спадає із збільшенням відстані *х*. Тому частинки, після подолання стінки заглиблюються в область бар’єра тільки на дуже малу відстань і повертаються назад. При цьому глибина заглиблення тим більша, чим менша величина *k* (4.11), тобто чим більша початкова кінетична енергія

*K*0  *E*

(і швидкість) частинки. Описана поведінка квантової частинки зовні

нагадує відбивання від поверхні води легкої кульки, що падає з деякої висоти: вона спочатку занурюється на певну глибину, а потім вискакує назад. При цьому глибина занурення зростає при збільшенні швидкості входження кульки у воду.

Якщо на шляху частинки трапляється бар’єр скінченної, причому дуже малої ширини *d*, існує помітна імовірність того, що вона заглибиться в область бар’єра на відстань *x* = *d*. В такому разі частинка подолає бар’єр і

зможе рухатися далі, хоча при недостатньою.

*E*  *U*0

її енергія для цього формально є

*Проходження частинок крізь бар’єр при енергії, меншій за його висоту, називається тунельним проходженням або тунельним ефектом.*

Імовірність тунельного проходження, інакше – *прозорість* бар’єра *D*, є пропорційною ймовірності проникнення частинки під бар’єр на відстань *x* = *d* і для прямокутного бар’єра (рис. 4.7*а*) наближено виражається формулою



|  |  |
| --- | --- |
|  2 2*m*(*U* *E* )*d**D*  e 0 | (4.12) |

0 *d x*1 *x*2

*U U*0

*U U*0

***а*) *б*)**

### Рис. 4.7

У випадку бар’єра довільної заданої форми *U* = *U*(*х*) (рис. 4.7*б*) прозорість виражається як



|  |  |
| --- | --- |
| *x*2  2  2*m*(*U* ( *x*)*E* )d*x**D*  e *x*1 | (4.12*а*) |

З наведених формул видно, що ймовірність тунелювання є дуже чутливою до маси частинки та характеристик бар’єра, зокрема, ширини. Наприклад, для електронів при *ефективній висоті* прямокутного бар’єра

*U*0  *E*  1,0 еВ

розрахунки за формулою (4.32) для різної ширини *d* дають:

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| *d*, нм | 0,2 | 0,5 | 1,0 | 2,0 |
| *D* | 0,135 | 0,007 | 4,5105 | 2,11010 |

Отже, прозорість бар’єра є помітною лише при гранично малій його ширині, і може здатися, що на практиці спостерігати тунельний ефект неможливо. Але це не так. Достатньо вузькі й помірно високі бар’єри створюються для валентних електронів ядрами атомів у твердих тілах. При

цьому через велику концентрацію електронів ( 1023 1 см3 ), навіть при дуже

малій прозорості бар’єрів відбувається велика кількість тунельних переходів. Це зумовлює низку характерних тунельних явищ, які не лише спостерігаються в експериментах, а й використовуються на практиці.

***Тунельні явища*.** Одним із проявів тунельного ефекту є виникнення так званої *контактної різниці потенціалів* при дотику двох різних металів або інших електропровідних матеріалів.

У кожному металі для вільних електронів на межі з вакуумом існує потенціальний бар’єр типу сходинка. Для його подолання і виходу з металу електрон має виконати роботу виходу *А*, яка щонайменше в десятки разів перевищує середню енергію теплового руху електронів при кімнатній

температурі. Тому електрони не здатні вільно виходити з металу. Але при дотику двох металів ситуація істотно змінюється – потенціальний бар’єр для електронів, звичайно, не зникає, проте стає дуже вузьким. І, хоча долати бар’єр «класично» за рахунок теплової енергії електрони не можуть, вони стають здатні подолати його тунельно. Тому частина електронів із металу, в якому зайняті більш високі енергетичні рівні, переходить на вільні енергетичні рівні другого металу. Відтак перший заряджається позитивно, а другий негативно, і між металами виникає відповідна контактна різниця потенціалів. Доказом саме тунельного, а не теплового механізму переходу електронів є те, що контактна різниця потенціалів установлюється практично миттєво при будь-яких температурах, включно з близькими до 0 К.

Вузький потенціальний бар’єри для електронів на межі метал-вакуум можна створити також за допомогою сильного неоднорідного електричного поля. Для цього виготовляють вакуумні лампи з катодом (негативним електродом) у вигляді гострої голки. При подаванні на таку лампу прямої напруги («+» на аноді) біля вістря (катода) виникає дуже сильне електричне

поле (до 107 В см і більше). Це поле напрямлене до вістря, тому при

віддаленні від нього потенціал стрімко зростає, а потенціальна енергія електрона відповідно зменшується. Таким чином створюється вузький потенціальний бар’єр, крізь який електрони можуть тунелювати з катода і далі прискорено рухаючись до анода, створювати в лампі електричний струм Це явище називається автоелектронною (або «холодною») емісією. Воно використовується у так званих лампах із холодним катодом, які мають великі переваги перед іншими аналогічними функціональними елементами в деяких спеціальних електронних схемах.

Ще одним електронним приладом, де використовується тунельний ефект, є так званий тунельний діод, у якому струм зумовлений тунельним проходження носіїв крізь бар’єр із керованими параметрами (шириною та висотою).

У діелектриках теж має місце тунельний ефект, хоча прийнято вважати, що електрони в діелектрику «прив’язані» до своїх ядер. Насправді це не

зовсім так, оскільки через малу відстань між атомами (

1010 м) ядра

створюють для електронів вузькі і достатньо прозорі потенціальні бар’єри. Тому валентні електрони не тільки в металах, а й у діелектриках інтенсивно рухаються від атома до атома. Але це не спричинює електропровідності, бо такий тунельний рух в діелектрику можливий тільки внаслідок обміну

електронами між сусідніми атомами і не створює перенесення електричного заряду, себто струму.

На завершення зазначимо, що тунельний ефект спостерігається не лише для електронів, а й для масивних частинок, але з набагато меншою ймовірністю. Як приклад можна навести радіоактивний ** - розпад атомних ядер, при якому з ядра самовільно вилітають масивні ** - частинки (ядра атомів гелію). Між нуклонами в ядрі діють надзвичайно потужні ядерні сили зчеплення, тому вихід ** - частинки з ядра за рахунок кінетичної енергії виключається, і можливе лише тунельне проходження. Правда, через велику

106 åÂ

висоту бар’єра 

і масу ** - частинки 

1026 êã

імовірність такого

процесу дуже мала. Цим пояснюється те, що для багатьох ** - активних елементів час, за який розпадається помітна частка ядер, вимірюється тисячами і десятками тисяч років.

### Контрольні запитання

1. Отримайте рівняння Шрьодінгера для стаціонарних станів (4.4) із загального рівняння (4.2) за допомогою підстановки (4.3).
2. Чим поведінка мікроскопічної частинки в потенціальному ящику принципово відрізняється від руху маленької кульки між стінками всередині маленької коробочки?
3. Отримайте енергетичний спектр (4.12) частинки в одновимірному ящику за допомогою співвідношень де-Бройля (3.3).
4. Доведіть за допомогою принципу невизначеності, що мікрочастинка в потенціальному ящику не може перебувати в стані спокою.
5. Оцініть найменшу можливу енергію частинки в одновимірному потенціальному ящику за допомогою принципу невизначеності.
6. Запишіть формулу енергетичних рівнів частинки маси *m*, яка знаходиться в двовимірному квадратному потенціальному ящику зі стороною *а*. Чому дорівнює енергія основного стану такої частинки?
7. Які енергетичні рівні називаються виродженими? Що таке кратність виродження?
8. Чому дорівнює максимальна можлива кратність виродження енергетичного рівня для частинки в квадратному потенціальному ящику?
9. Згідно з (4.25) і (4.25*а*), атоми твердого тіла, котрі можна трактувати як квантові осцилятори, навіть при температурі *Т* = 0 К перебувають у русі. Як це узгоджується з уявленням про абсолютний нуль температури як температуру, при якій припиняється тепловий рух частинок речовини?
10. Скільки частот можна спостерігати в спектрі випромінювання лінійного гармонічного квантового осцилятора?
11. Чим принципово відрізняється поведінка квантової частинки та матеріальної точки (класичної частинки), коли на шляху їхнього руху трапляється потенціальний бар’єр?
12. Чим відрізняється поведінка класичної та квантової частинок при зіткненні з потенціальним бар’єром типу сходинка, висота якого більша за кінетичну енергію частинки?
13. У чому полягає тунельний ефект? Що називається прозорістю бар’єра?
14. Як і в скільки разів зміниться потік частинок, які тунелюють крізь прямокутний бар’єр, якщо в 10 разів збільшиться: а) ширина бар’єра; б) його ефективна висота.
15. Порівняйте імовірності тунельного проходження крізь один і той самий

31

бар’єр для електрона ( *me*  9,110 кг ) і для та протона

( *m* 1,66 1027 кг ).

*p*

### Задачі

**Задача 4.1.** Розглядаючи електрон як частинку в потенціальному ящику ширини *l*, оцінити енергію (в еВ), необхідну для переведення електрона з основного на перший збуджений рівень:

* 1. у кусочку металу розміром *l* = 1,0 мм;
	2. в атомі Гідрогену, прийнявши

*l*  1010 м.

**Розв’язування.** Згідно з формулою (4.12), для переведення частинки з певного енергетичного рівня на наступний потрібна енергія

2*ml* 2

*n*  1  *n*   **

2 2

2*ml* 2

    **

2 2

2*n* 1

*ml* 2

*n*.

*E* 

У заданому випадку *n* = 1, то ж

*E* 

** 2 2

*ml* 2

 *E*  7,5 1013 еВ,

*E*2  75 еВ.

Як видно, для металу відстань між енергетичними рівнями є гранично малою, тому в багатьох задачах електронної теорії металів можна нехтувати дискретністю енергетичного спектра, і розглядати електрон як класичну частинку. Що ж до атома, то в ньому квантові ефекти є визначальними. Правда, слід зазначити, що отримана оцінка суттєво відрізняється від

1

істинної величини

*E* 10 еВ , яку дає точний квантовомеханічний

розрахунок. Це пояснюється тим, що прийняте в задачі трактування електрона в атомі як вільної частинки в ящику з вертикальними стінками є досить грубим.

**Задача 4.2.** На якому енергетичному рівні знаходиться частинка в

одновимірному потенціальному ящику, якщо відстані *E*

між ним і

найближчими сусідніми рівнями відрізняються в ** 1,4 рази?

**Розв’язування.** За умовою задачі

**  *E*2

*E*1

 *En*1  *En* .

*En*  *En*1

Виразивши енергії за формулою (4.12), отримаємо:

 ** 2 2

*E*1  2*ml* 2 2*n* 1

 ** 2 2

 ** 

*E*1 

*E*2

2*n*  1.

2*n* 1

*E*2  2*ml* 2 2*n*  1

Звідси знаходимо відповідь:

*n*  **  1  3.

2(** 1)

**Задача 4.3.** Частинка маси *m* перебуває в першому збудженому стані в одновимірному ящику ширини *l*. Визначити ймовірність знаходження частинки в зоні шириною *l*/4, яка: 1) прилягає до стінки ящика; 2) розміщена симетрично посередині.

**Розв’язування.** Імовірність *Р* знаходження частинки в заданій області простору *x*1, *x*2 , згідно з виразами (3.8*а*) і (3.9), визначається через хвильову

функцію, як

*x*2

*P*   ** (*x*) 2 d*x*.

*x*1

Хвильова функція частинки в ящику в першому збудженому стані визначається виразом (4.11) при *n* = 2. Отже,

|  |  |
| --- | --- |
| 2 *x*2 2** *x* 1 *l* 4** *x* *x*2*P*   sin2  d*x*   *x*  *x*   cos  .*l l l*  2 1 4** *l* *x*1 *x*1 | (1) |

Згідно з умовою, для першої зони

*x*1  0 ,

*x*2  *l*

4 , а для другої

*x*1  3*l* 8 ,

*x*2  5*l*

8 . Підставивши ці значення в (1), отримаємо:

*P*1  0,33; *P*2  0,09.

**Задача 4.3.** За допомогою принципу невизначеності оцінити мінімальну енергію (енергію «нульових коливань») квантового лінійного осцилятора з частотою ** .

**Розв’язування.** Енергія гармонічного осцилятора

|  |  |
| --- | --- |
| *p*2 *kx*2*E*  0 ,2*m* 2 | (1) |

де *р* – максимальний імпульс, а

*x*0 – максимальне відхилення від точки

рівноваги *х* = 0, яке є мірою невизначеності координати осцилятора. Оскільки у принципі невизначеності фігурують як імпульс, так і координата, вираз (1) доцільно переписати симетрично:

|  |  |
| --- | --- |
| 1  *p*2 *kx*2 *E*   0 . 2  2*m* 2  | (2) |

У теорії говорилося, що в основному стані невизначеність координати за порядком величини дорівнює дебройлівській довжини хвилі частинки, а невизначеність імпульсу – самому імпульсу. В такому випадку із співвідношень Гайзенберга (3.11) випливає:

*x*0 *p*  

*x*0

.

 *p*

За допомогою такої підстановки у формулу (2) можна отримати

оціночний вираз енергії осцилятора тільки через величину

*x*0 :

|  |  |
| --- | --- |
| 1  2 *kx*2 *E*   0 . 2  2*mx*2 2 0 | (3) |

Оскільки енергія осцилятора в основному стані є мінімальною,

величину *x*0

знайдемо, наклавши умову (d*Е*/d*t*) = 0 на вираз (3):

d*E* d*x*0

 1  



2

*mx*3

* *kx*  0

0 





*x*2 

0

.

0



*km*

2 

Підставляючи отриману величину *x*0

у вираз (3) враховуючи формулу

(4.22), можна знайти й оцінку мінімальної енергії осцилятора простіше зробити це за допомогою формули (1):

*E*0 , але

*E*  *k* 

*km*

 1

2

*m* 2

*k*  1

**.

0 2

Слід зауважити, що отримане оціночне значення *E*0

(4.25*а*), але такий збіг є випадковим.

співпадає з точним

**Задача 4.4.** Однорідний потік електронів з енергією *Е* = 8,5 еВ і

густиною потоку

*n*  1020 1 cñì 2

налітає на прямокутний потенціальний

бар’єр висоти *U* = 9,0 еВ і ширини *d* = 1,0 нм. Оцінити густину створюваного електронами тунельного струму *j*.

0

**Розв’язування.** Густина тунельного струму *j*, що створюється пучком електронів, які проходять крізь бар’єр, дорівнює кількості електрики, яку вони переносять через одиничну площадку за одиницю часу. Отже *j*  *ne* , де

*е* – елементарний заряд, і *n*  густина потоку в електронному пучку на виході

з бар’єра, яка дорівнює

*n*  *n*0 *D* , де імовірність тунельного проходження

електрона *D* (прозорість бар’єра) задається формулою (4.32):

*D*  exp2 2*m*(*U*0  *E*) . Отже шукана густина тунельного струму

Обчислення дають:

 2 2*m*(*U* *E* )*d*

0

*j*  *en*0

 e .

*j*  1,6 1019 1020  e

 2 29,11031(98,5)1,61019 109

1,051034

 1 мкА см2 .

**Задача 4.5.** Виходячи з формули (4.31), знайти вираз (4.31*а*) прозорості бар’єра довільної форми *U* = *U*(*x*).

*U*

|  |  |
| --- | --- |
| *U*2*U*1 |  |
|  |  |   |
|  |
| *E* |  |  |

*U*i

*E*

*d*1 *d*2

***а*)**

*X x*1 *x x*2 *X*

***б*)**

### Рис. 4.7

**Розв’язування.** Розглянемо спочатку прозорість бар’єра, показаного на рис. 4.7*а*. Подолати такий бар’єр означає для частинки послідовно пройти крізь два прямокутних бар’єра різної висоти. При цьому, якщо прозорість

другого прямокутного бар’єра складає

*D*2 , то кількість частинок на виході

*n*2  *n*1*D*2 , де *n*1 – кількість частинок, які подолали перший бар’єр. Величина

*n*1 визначається так само через кількість частинок *n*, які налітають на

подвійну сходинку, та прозорість

*D*1 першого бар’єра:

*n*1  *nD*1 . Тому

кількість частинок, які подолають такий ступінчастий бар’єр, дорівнює

*n*2  *nD*1*D*2.

Звідси випливає, що прозорість (імовірність подолання) розглянутого

бар’єра, рівна

*n*2 *n* , виражається, як

*D*  *D*1*D*2 . Міркуючи так само,

отримаємо для ступінчастого бар’єра із довільною кількістю сходинок *n*:

|  |  |
| --- | --- |
| *D*  *D*1  *D*2  *Di*  *Dn*   *Di* .*i* | (1) |

Отриманий результат можна поширити й на бар’єр із гладкою залежністю *U*(*х*), рис. 4.7*б*. Для цього спочатку подумки замінимо його

послідовністю вузеньких бар’єрів ширини

*x*i , і відповідної висоти *U*i

(штрихові лінії на рисунку). Тоді прозорість *D*, згідно з виразом (1) і формулою (4.32), наближено запишеться, як



|  |  |
| --- | --- |
|  2  2*m**U* *E* *x**i i**D*  e *i* . | (2) |

Очевидно, що при зменшенні ширини

*x*i

та висоти *Uі* сходинок і

наближенні ступінчастої лінії до гладкої кривої *U*(*х*), вираз (2) буде ставати

все точнішим і стане зовсім точним у границі

*x*i  0 . При цьому сума в

показнику експоненти трансформується в інтеграл. У підсумку отримуємо вираз (4.32*а*):

2 *x*2

 

*D*  e *x*1

2*m**U* ( *x*)*E* d*x*

.

**Задача 4.6.** Відомо, що при вміщенні металу в сильне електричне поле **Å** , напрямлене до поверхні, на межі метал-вакуум створюється вузький потенціальний бар’єр, і спостерігається автоелектронна емісія – вихід

електронів завдяки тунельному ефекту. Вважаючи поле однорідним, оцінити

ймовірність виходу електрона (прозорість бар’єра) в залежності від величини напруженості поля **Å** та роботи виходу *W* електрона з металу.

**Розв’язування.** При виході з металу кінетична енергія електрона зменшується, а потенціальна збільшується на величину роботи виходу *W* . Тому на межі метал-вакуум для електронів створюється потенціальний бар’єр типу “сходинка” висоти *W* (штрихова лінія на рис. 4.8), для

подолання якого необхідно виконати роботу виходу

*W*  *U*0  *E*

порядку 1

еВ. Ця величина щонайменше в десятки разів перевищує середню енергію теплового руху електронів, тому вони не здатні виходити з металу.

*U*0

*W*

**E**

*E*

метал

*U*

0 *d X*

### Рис. 4.8

Але ситуація суттєво змінюється, якщо метал вмістити в зовнішнє електричному полі **Å** напрямлене до поверхні. У такому випадку після виходу з металу електрон буде прискорено відділятися під дією сили *F*  *e***Å**

з боку поля. При цьому за законом збереження енергії кінетична енергія

електрона буде збільшуватись, а потенціальна зменшуватися на величину

роботи поля: *K*  *U*  *A*. Оскільки за умовою поле однорідне **Å**  const,

його робота на відстані *х* дорівнює *A*  *Fx*  *e***Å***x* . Відповідно,

|  |  |
| --- | --- |
| *U*  *U*0  *U* (*x*)  *e***Å***x*  *U* (*x*)  *U*0  *e***Å***x*. | (1) |

Цей вираз показує, що на межі метал-вакуум створюється бар’єр у формі «зубця», (суцільна лінією на рис. 4.8). Його прозорість можна знайти з виразу (4.32*а*)

2 *d*



*D*  e

 2*m**U*  *x**E* d*x*

0 ,

попередньо визначивши параметри бар’єра.

Величина *U* (*x*)  *E* , згідно з виразом (1), дорівнює

*U*0  *e***Å***x*  *E*  *W*  *e***Å***x*.

Ефективна ширина бар’єра *d* залежить від енергії електрона і визначається умовою *U*(*d*) = *Е*:

|  |  |
| --- | --- |
| *U*  *e***Å***d*  *E*  *d*  *U*0  *E*  *W* ,0 *e***Å** *e***Å** | (2) |

де *W*  робота виходу. Отже, шукана прозорість бар’єра визначається, як



|  |  |
| --- | --- |
| 2 *d* *  2*m*(*W* *e***Å***x*)d*x*

*D*  e 0 . | (3) |

Інтеграл у показнику експоненти легко обчислюється:

*d*

  d*x*  

2*m*(*W*  *e***Å***x*)

0

3*e***Å**

*d*

(*W*  *e***Å***x*)3 2 

2 2*m*

0

,

2 2*m* *W* 3 2

3*e***Å**

де враховано вираз (2). Підставивши отримане значення інтеграла у вираз (3), дістанемо остаточно:

*D*  e

 **

**Å** , де ** 

4 2*m* *W* 3 2

.

3*e*

Коментуючи отриманий результат, зауважимо, що величина *D* зростає при збільшенні напруженості поля **Å** . При цьому в сильних, але реально досяжних полях спостерігаються помітні потоки тунельних електронів, що дозволяє використовувати тунельну (автоелектронну) емісію на практиці