

## ЛЕКЦИЯ 7

## Общие свойства одномерного движения. Осцилляционная теорема. Движение в периодическом поле

## 7.1. Общие свойства одномерного движения

На предыдущей лекции было показано, что в зависимости от потенциалов  $V_1$  и  $V_2$  и вне зависимости от формы потенциала  $V(x)$  (см. рис. 7.1) существуют три области, решения уравнения Шредингера в которых различны:

- (I) :  $E > V_2 \geq V_1$ ;  
 (II) :  $V_2 > E > V_1$ ;  
 (III) :  $E < V_1 \leq V_2$ .

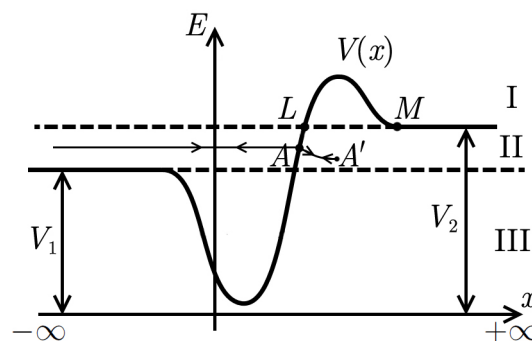


Рис. 7.1.

Для первой области решение имело осциллирующий характер при значениях  $x$ , стремящихся как к  $+\infty$ , так и к  $-\infty$ . Для этой области были получены значения коэффициентов прохождения и отражения от барьера и показано, что их сумма равна единице.

Было также показано, что вне зависимости от формы потенциала и направления распространения частицы (справа налево или слева направо) значения коэффициентов отражения и прохождения не меняются. Из существования коэффициентов прохождения и преломления вне зависимости от формы потенциала и, в частности, формы «горба»  $LM$ , следует существование двух неклассических эффектов:

- Подбарьерного (туннельного) прохождения;
- Надбарьерного отражения.

В области II при

$$x \rightarrow +\infty$$

решение уравнения Шредингера имеет затухающий вид

$$\Psi = Ae^{\kappa x} + Be^{-\kappa x}, \quad \kappa^2 = \frac{2m(V_2 - E)}{\hbar^2}. \quad (7.1)$$

Поскольку на бесконечности вероятности найти частицу должна равняться нулю, то решение (7.1) будет иметь физический смысл только в том случае, когда

$$A = 0,$$

то есть не существует экспоненциально растущего при  $x \rightarrow +\infty$  множителя.

При  $x \rightarrow -\infty$  решение имеет осциллирующий характер:

$$\Psi \rightarrow \alpha_{11}e^{ik_1x} + \alpha_{12}e^{-ik_1x}, \quad k_1^2 = \frac{2m(E - V_1)}{\hbar^2}.$$

Если при  $x \rightarrow +\infty$  остается только решение, пропорциональное  $e^{-\kappa x}$ , то плотность потока вероятности

$$j = 0, \quad x \rightarrow +\infty,$$

## Лекция 7. Общие свойства одномерного движения, движение в периодическом поле

поскольку на прошлой было показано, что для ненулевой плотности потока вероятности в решении (7.1) должна существовать экспонента, показатель которой является мнимой величиной, зависящей от  $x$ .

Следовательно, на левом конце оси  $x$  плотность потока вероятности также равна нулю

$$j = 0, \quad x \rightarrow -\infty.$$

Это означает, что

$$|\alpha_{11}|^2 = |\alpha_{12}|^2,$$

поскольку плотность потока вероятности определяется следующим соотношением:

$$j = \frac{\hbar k_1}{m} (|\alpha_{11}|^2 - |\alpha_{12}|^2).$$

Введем следующие обозначения:

$$\alpha_{11} = Ce^{i\delta}, \quad \alpha_{12} = Ce^{-i\delta}.$$

В этом случае решение при  $x \rightarrow -\infty$  можно представить следующим образом:

$$\Psi \sim \cos kx + \delta.$$

Следовательно, область (II) отвечает тому, что волна, падающая на потенциальный барьер в точку  $A$  (см. рис. 7.1), немного проникает за барьер (до точки остановки  $A'$ ) и затем полностью отражается.

Отличие от классической механики заключается в том, что в классической механике точка  $A$  — точка остановки частицы, в которой направление движения частицы меняет знак на противоположный. В квантовой механике, как было сказано ранее, частица может быть найдена внутри потенциального барьера.

Так как в данном случае существует только один тип движения, то спектр невырожденный по энергии. Решение существует и единственное, однако спектр непрерывный.

Случай (II) напоминает явление полного внутреннего отражения в оптике: если свет падает на границу раздела двух сред и показатель преломления среды, из которой падает свет, больше, происходит полное внутреннее отражение.

**Пример 7.1.** Несмотря на это, свет частично проходит в другую среду. Г.С. Ландсберг показал это с помощью следующего опыта (см. рис. 7.2).

Пусть в сосуде (1) налита жидкость, которая может светиться под воздействием излучения. Лучи света (2), попадая на поверхность сосуда, испытывают полное внутреннее отражение, однако поверхностный слой жидкости (3) люминесцирует под воздействием этих лучей.

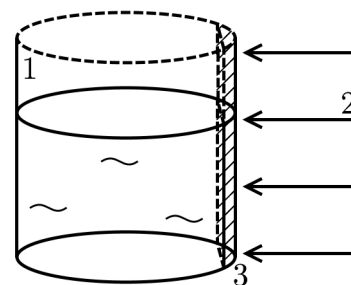


Рис. 7.2.

Затухание под барьером, аналогичное случаю (II) (см. рис. 7.3), возможно и в случае (I), когда

$$E > V_2 \geq V_1.$$

В этом случае, однако, барьер имеет конечную длину. Следовательно, волна может пройти сквозь барьер (кривая  $AB$  на рисунке 7.3) и продолжить распространение, но уже с меньшей амплитудой.

Рассмотрим область (III), в которой

$$E < V_1 \leq V_2.$$

В этом случае при

$$x \rightarrow +\infty$$

выберем, как и в случае (II), только одно решение с единичной амплитудой, обладающее физическим смыслом:

$$\Psi_1 \rightarrow e^{-\kappa_2 x}, \quad \kappa_2^2 = \frac{2m(V_2 - E)}{\hbar^2}.$$

В этом случае на другом конце оси  $x$  при

$$x \rightarrow -\infty$$

решение  $\Psi_2$  будет иметь следующий вид:

$$\Psi_2 \rightarrow \alpha_{11}(E)e^{-\kappa_1 x} + \alpha_{12}(E)e^{\kappa_1 x}, \quad \kappa_1^2 = \frac{2m(V_1 - E)}{\hbar^2}. \quad (7.2)$$

Очевидно, что при  $x \rightarrow -\infty$  решение

$$\alpha_{12}e^{\kappa_1 x}$$

затухает, в то время как первое слагаемое в выражении (7.2) для волновой функции растет экспоненциально.

Для произвольной энергии  $E$ , несмотря на наличие экспоненциально падающего решения, это решение неприемлемо с физической точки зрения. Таким образом, физически приемлемого решения для произвольной энергии не существует.

Однако решение, например, для шара, находящегося в потенциальной яме, существует в классической механике (см. рис. 7.4). Приемлемое решение может быть получено в том случае, когда коэффициент

$$\alpha_{11}(E)$$

в выражении (7.2) при определенной энергии  $E$  обратится в ноль.

В этом случае решение уравнения Шредингера будет приемлемо с физической точки зрения для дискретных значений энергии

$$E = E_1, E_2, \dots, E_n.$$

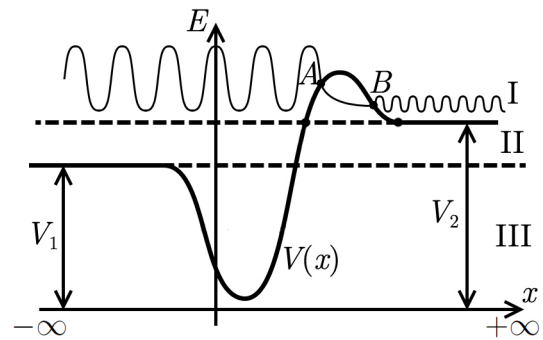


Рис. 7.3.

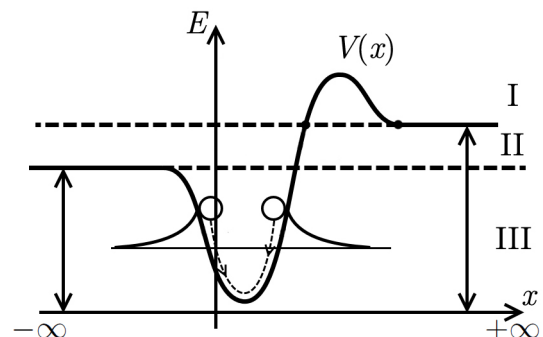


Рис. 7.4.

Теоретически, возможно существование решения, не содержащего ни одного значения энергии.

При дискретных значениях энергии, соответствующих физически приемлемому решению, решение будет экспоненциально затухать внутри потенциала как при значениях  $x \rightarrow +\infty$ , так и при  $x \rightarrow -\infty$ .

Рассмотрим наглядную модель всех трех случаев:

- **Третий случай.** Пусть струна закреплена с двух концов: в этом случае колебания возможны, если в длину струны укладывается целое число длин волн, то есть при дискретных значениях длин волн.

Таким образом, в этой аналогии отсутствие экспоненциально растущего решения на обоих концах означает закрепление этих концов.

Шредингер был противником идей дискретности, существования различных скачков в квантовой механике. В своей биографии он писал, что не знал, что ограниченность на бесконечности является краевым условием, которое является правилом отбора определенных длин волн.

- **Второй случай** Этот случай аналогичен струне, закрепленной лишь с одной стороны (например, — садовому шлангу). Если пустить по такой струне волну, то она отразится с той же амплитудой.
- **Первый случай** Этот случай соответствует струне, у которой оба конца свободны. В этом случае волну можно пустить как в одну, так и в другую сторону.

Таким образом, дискретные значения энергии получаются благодаря требованию, чтобы при

$$x \rightarrow -\infty, \quad x \rightarrow +\infty$$

не существовало экспоненциально растущих решений.

## 7.2. Осцилляционная теорема

Рассмотрим графическое представление, из которого можно понять, почему в достаточно глубокой потенциальной яме всегда найдется решение при некоторых дискретных значениях энергии. Рассмотрим симметричную потенциальную яму (см. рис. 7.5). В уравнении Шредингера

$$\Psi'' + \frac{2m(E - V(x))}{\hbar^2} = 0 \quad (7.3)$$

функция  $\Psi''$  обращается в ноль в двух случаях: когда функция  $\Psi$  равна нулю и в точках остановки:

$$\Psi'' = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad \begin{cases} \Psi = 0, \\ V(x_i) = E. \end{cases}$$

Из курса математического анализа известно, что если вторая производная некоторой функции  $\Psi$  положительна, то на графике зависимости  $\Psi(x)$  функция выпукла вниз, а если отрицательна, то функция  $\Psi$  выпукла вверх.

Пусть сначала

$$E < V.$$

В этом случае, согласно (7.3), вторая производная  $\Psi''$  всюду больше нуля

$$\Psi'' > 0, \quad x \in (-\infty, +\infty).$$

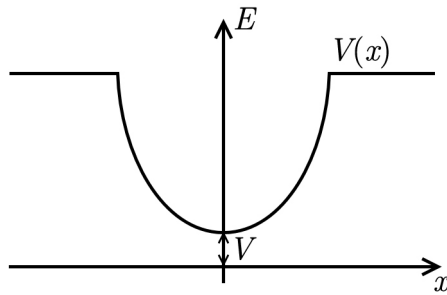


Рис. 7.5.

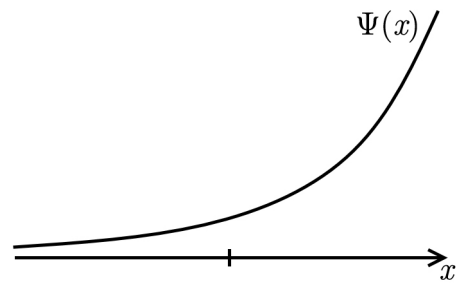


Рис. 7.6.

Следовательно, волновая функция будет всюду выпукла вниз. В этом случае наличие экспоненциального падения функции  $\Psi$  на левом конце оси  $x$  будет означать, что при  $x \rightarrow +\infty$  эта функция будет иметь бесконечно большое значение (см. рис. 7.6).

Следовательно, это решение не будет иметь физического смысла.

Пусть теперь энергия частицы в симметричной потенциальной яме (см. рис. 7.7)  $E$  такова, что

$$E_1^* = E > V.$$

В этом случае, если потребовать экспоненциальное затухание при

$$x \rightarrow -\infty,$$

то, пройдя через точку остановки  $A$ , в которой вторая производная обращается в ноль, вторая производная функции  $\Psi$  должна изменить знак.

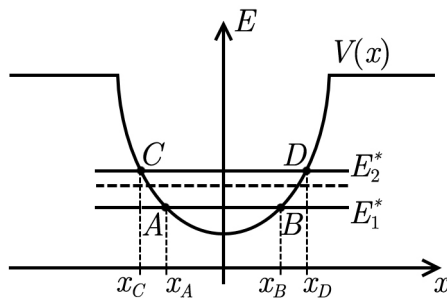


Рис. 7.7.

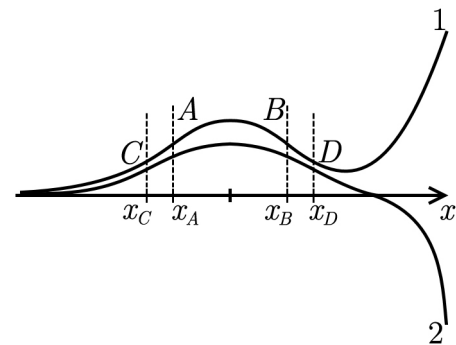


Рис. 7.8.

Следовательно, между точками остановки  $A$  и  $B$  с координатами  $x_A$  и  $x_B$  (см. рис. 7.8) функция  $\Psi$  будет выпукла вверх.

В точке остановки  $B$  с координатой  $x_B$  вторая производная снова обратится в ноль, поэтому при всех  $x$  таких, что

$$x \in (x_B, +\infty),$$

волновая функция  $\Psi$  снова станет выпукла вниз, на правом конце оси  $x$  устремляясь к  $+\infty$  (кривая (1) на рисунке 7.8). Следовательно, такое решение также не имеет физического смысла.

Пусть теперь

$$E_2^* > E_1^*.$$

В этом случае кривая (2), пройдя вторую точку остановки  $D$  с координатой  $x_D$ , может пересечься с осью  $x$ . Если это произойдет, то вторая производная при таком переходе снова изменит знак. Характер выпуклости изменится на противоположный, то есть на интервале

$$(x_D, +\infty)$$

функция  $\Psi$  будет все время выпукла вверх, то есть будет падать при  $x \rightarrow +\infty$ .

Таким образом, кривая (1) на рисунке 7.8 пропорциональна

$$Ae^{\kappa x}, \quad A > 0,$$

а кривая (2) пропорциональна функции

$$Be^{\kappa x}, \quad B < 0.$$

Это означает, что между значениями энергии  $E_1^*$  и  $E_2^*$  найдется некоторое значение, при котором функция  $\Psi(x)$  обратится в ноль (пересечет ось  $x$  и, таким образом, изменит характер выпуклости на противоположный) только при

$$x \rightarrow +\infty.$$

В этом случае полученное решение будет иметь физический смысл.

Пусть теперь в достаточно глубокой потенциальной яме (см. рис. 7.9) при энергии

$$E = E_3^* > E_2^*$$

функция  $\Psi(x)$  могла бы колебаться в потенциальной яме, обратившись в ноль в некоторой точке  $x_3^*$ , находящейся между точками  $A$  и  $B$  с координатами  $x_A$  и  $x_B$ .

В этом случае на интервале

$$(x_A, x_3^*)$$

функция  $\Psi(x)$  выпукла вверх, а на интервале

$$(x_3^*, x_B)$$

эта функция будет выпукла вниз, поскольку при переходе через  $\Psi(x) = 0$  характер выпуклости меняется.

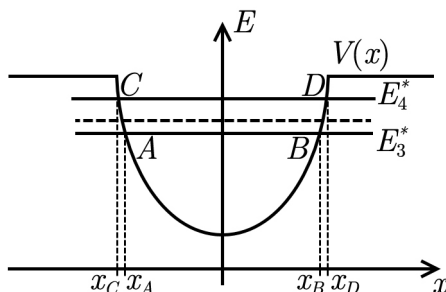


Рис. 7.9.

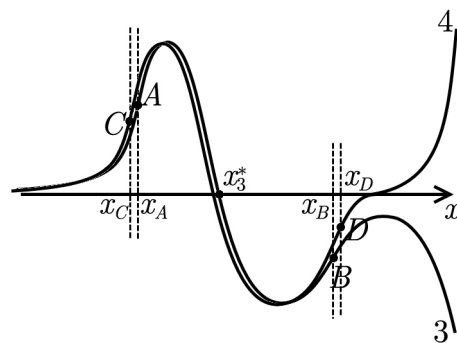


Рис. 7.10.

В точке  $x_B$  характер выпуклости функции также должен измениться (она станет выпукла вверх) и при

$$x \rightarrow +\infty, \quad \Psi(x) \rightarrow -\infty,$$

то есть такая функция не имеет физического смысла.

Описанную зависимость выражает кривая (3) на рисунке 7.10.

Пусть теперь энергия частицы в достаточно глубокой потенциальной яме (см. рис. 7.9) такова, что

$$E = E_4^* > E_3^*.$$

В этом случае возможно, что кривая (4) (см. рис. 7.10) после смены характера выпуклости в точке  $D$  с координатой  $x_D$  пересечет ось  $x$  в точке  $x^{**}$ . В этой точке характер выпуклости функции  $\Psi(x)$  снова изменится на противоположный. Это приведет к тому, что при всех  $x$  таких, что

$$x \in (x^{**}, +\infty)$$

функция  $\Psi$  будет выпукла вниз, что приведет к ее экспоненциальному росту ее значения при  $x \rightarrow +\infty$ .

Следовательно, между энергиями  $E_3^*$  и  $E_4^*$  существует значение энергии, при котором вид волновой функции будет таков, что она пересечет ось  $x$  при

$$x \rightarrow +\infty,$$

то есть будет затухать. Такой вид волновой функции также имеет физический смысл.

Из этих рассуждений можно сделать вывод, что первый уровень от «дна» потенциальной ямы отвечает волновой функции, не обращающейся в ноль ни при каких значениях  $x$ .

Следующий уровень будет отвечать тому, что существует ровно одна точка, где волновая функция обращается в ноль (ровно один ноль волновой функции). Если яма достаточно глубокая, то может существовать следующий уровень, которому будет соответствовать волновая функция с двумя нулями.

Это утверждение носит название **осцилляционной теоремы**. В дальнейшем, при изучении уровней осциллятора будет показано, что распределение уровней соответствует осцилляционной теореме: у первого уровня нулей не окажется, а у  $n$ -ого их будет ровно  $n - 1$ .

**Пример 7.2.** Рассмотрим короткодействующую потенциальную яму (см. рис. 7.11).

Пусть существует уровень энергии, мало отличающийся от нуля (будем считать, что на бесконечности потенциал равен нулю)

$$V(-\infty) = V(+\infty) = 0,$$

а  $\varepsilon$  — энергия связи в этой яме.

Поскольку этот уровень отвечает затуханию и к  $+\infty$ , и к  $-\infty$ , то волновая функция будет иметь следующий вид:

$$\Psi \sim C e^{-\frac{\sqrt{2m|\varepsilon|}}{\hbar} x}. \quad (7.4)$$

Выражение (7.4) получено при подстановке в (7.3)

$$E = \varepsilon < 0, \quad V(x) = 0$$

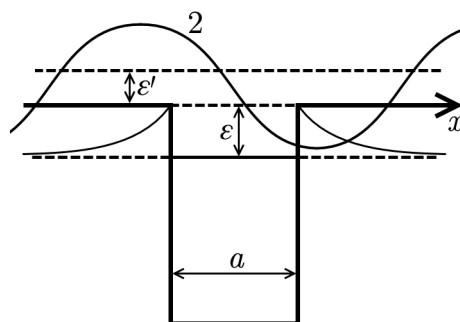


Рис. 7.11.

и последующем решении получившегося дифференциального уравнения второго порядка.

Найдем расстояние, на котором происходит эффективное затухание. Будем считать, что эффективное затухание происходит, когда значение функции уменьшается в  $e$  раз (то есть на расстояниях, при которых показатель экспоненты в выражении (7.4) оказывается порядка единицы):

$$x_0 \sim \frac{\hbar}{\sqrt{2m|\varepsilon|}}.$$

Заметим, что  $x_0$  — расстояние, на которое волновая функция будет распространяться под потенциальным барьером  $V(x)$ .

Пусть размер ямы равен  $a$ . Если  $\varepsilon$  мало отличается от нуля, то

$$x_0 \gg a.$$

В классической механике, если бы частица оказалась справа от потенциальной ямы (см. рис. 7.11), где потенциал равен нулю (то есть на частицу не действуют никакие силы), ничто не могло бы вернуть ее в потенциальную яму: частица продолжала бы распространяться в положительном направлении оси  $x$ .

Однако, в квантовой механике, оказывается, существует **связанное состояние**, причем его размеры значительно больше размеров потенциальной ямы.

Пусть существует другая частица с энергией

$$E = \varepsilon' > 0,$$

но мало отличающейся от нуля.

В этом случае ее колебательное движение (кривая (2) на рисунке 7.11) будет близко к движению первой частицы в потенциальной яме.

Таким образом, частица, подходящая к потенциальной яме, в которой имеет слабо связанный уровень «почувствует» яму значительно раньше, чем дойдет до ее границ.

Рассмотрим практическое применение этого эффекта. В ядерном реакторе на природном уране  $^{238}\text{U}$  делится уран  $^{235}\text{U}$ , масса которого составляет всего 0,07% от общей массы урана.

Это, однако, не является помехой для создания реактора на природном уране, поскольку у урана  $^{235}\text{U}$  существуют уровни, близкорасположенные к нулевой энергии.

В результате сечение захвата оказывается значительно больше, чем геометрические размеры ядра, что вызывает возможность захвата нейтронов атомами урана  $^{235}\text{U}$  со значительно большей вероятностью, чем атомами урана  $^{238}\text{U}$ . У  $^{238}\text{U}$  также существуют уровни, хоть и отстоящие от нулевой энергии дальше, чем уровни урана  $^{235}\text{U}$ , но все же близко лежащие к уровню нулевой энергии.

Наличие таких уровней вредно для ядерной реакции, поэтому их влияние приходится устранять.

Этот пример показывает сразу два неклассических эффекта:

- 1) Частица в потенциальной яме, в которой существует уровень энергии, близкий к нулевой энергии, может отходить далеко от области действия сил и при этом оставаться в связанном состоянии.
- 2) Рассеяние на такой частице может иметь очень большое эффективное сечение.



Второй эффект может иметь очень яркие проявления. Например, у атома гадолиния эффективное сечение захвата медленных нейтронов в миллион раз больше геометрических размеров ядра.

**Пример 7.3.** Рассмотрим подробнее уровни  $^{238}\text{U}$ , о которых говорилось в примере 7.2. Рассмотрим следующий потенциал (см. рис. 7.12).

Этот потенциал, казалось бы, отвечает второму случаю движения: если частица распространяется из области положительных значений координаты  $x$ , то, вне зависимости от ее энергии, она отразится и будет распространяться слева направо. С классической точки зрения, в небольшой яме  $OB$  возможны связанные состояния.

При достаточной глубине ямы такие состояния действительно возможны (кривая  $a$  на рисунке 7.12). В стационарном состоянии волновая функция на участке (1) затухает экспоненциально. На участке (2), где

$$x > x_2,$$

также возможно экспоненциальное затухание (когда растущая экспонента отсутствует).

В этом случае после прохождения потенциального барьера волна будет распространяться слева направо с некоторой маленькой амплитудой. В обычном (нестационарном состоянии), соответствующем кривой  $b$  на рисунке 7.12 на участке (2) наблюдается экспоненциальный рост, в результате чего амплитуда выходящей из неклассической области волны гораздо больше, чем у кривой  $a$ .

Таким образом, большинство уровней будут соответствовать тому, что волна с некоторой амплитудой, приходящая справа налево, затухает на первом потенциальном барьере и, отражаясь от второго, распространяется в обратном направлении.

Однако существуют дискретные уровни, в которых амплитуда внутри потенциальной ямы значительно больше, чем амплитуда снаружи этой ямы. Такие состояния называются **квазистационарными состояниями**. Если частица находится в таком состоянии, то для выхода из него может потребоваться длительное время.

Это явление, например, является причиной  $\alpha$ -распада:  $\alpha$ -частица может выйти из потенциальной ямы, но для этого ей нужно преодолеть барьер.

Если из области положительных  $x$  приходит частица с энергией, близкой к энергии квазистационарного состояния, то амплитуда внутри ямы, очевидно, оказывается гораздо больше, чем амплитуда падающей волны.

С ядрами  $^{238}\text{U}$  наблюдается именно такая ситуация: при сравнительно небольшой энергии

$$E \simeq 10 - 20 \text{ Эв}$$

существует несколько резонансных состояний, расположенных близко друг к другу.

В этом случае нейтрон, образующийся при делении  $^{235}\text{U}$  и имеющий энергию порядка 1 МэВ, проходя через вещество, замедляется, достигая энергии порядка  $E$  и захватывается ядрами  $^{238}\text{U}$  без последующего деления.

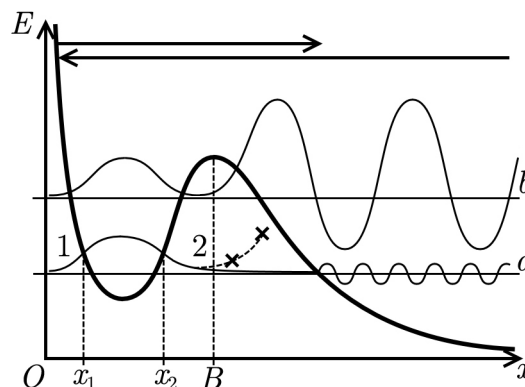


Рис. 7.12.

Этот эффект мешал бы осуществлению цепной реакции. Чтобы этого не происходило, было придумано следующее. Тепловыделяющими элементы (ТВЭЛы), обозначенные индексом (1) на рисунке 7.13, содержат «таблетки» из смеси  $^{235}\text{U}$  и  $^{238}\text{U}$ .

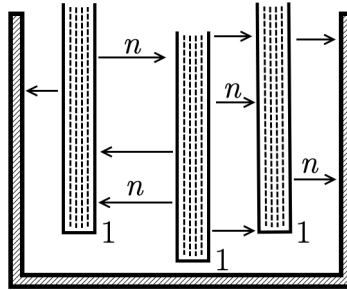


Рис. 7.13.

Между ТВЭЛами располагают графит. Нейтрон, вылетая из одного из ТВЭЛОВ, попадая в графит и сталкиваясь с ним, диффундирует. Это приводит к тому, что электрон замедляется, проходя «опасную» область, соответствующую энергии

$$E \simeq 10 - 20 \text{ Эв.}$$

Попадая в следующий ТВЭЛ, нейтрон, таким образом, избегает захвата ядрами  $^{238}\text{U}$ . Следовательно, графит в реакторах на тепловых нейтронах необходим для замедления нейтронов до энергии ниже порога захвата на квазистатических уровнях  $^{238}\text{U}$ . Благодаря существованию слабо связанных уровней  $^{235}\text{U}$ , происходит захват нейтронов атомами именно этого изотопа урана.

Такая система естественным образом авторегулируется. Предположим, что реакция в некоторый момент времени начинает происходить с большей интенсивностью.

В этом случае стационарные уровни энергии, испытывая доплеровское смещение, расширяются, и вероятность захвата на них увеличивается.

Таким образом, при ускорении реакции, благодаря уровням  $^{238}\text{U}$  увеличивается эффективность захвата, и скорость реакции замедляется: наблюдается обратная зависимость скорости реакции от температуры.

В реакторах с обогащенным ураном этот эффект не всегда учитывали. Причиной этого, в частности, стала катастрофа на Чернобыльской АЭС.

Еще одно важное направление — создание реакторов на быстрых нейтронах. Реакторы на быстрых нейтронах — гомогенные реакторы, в которых массовая доля  $^{235}\text{U}$  велика (обогащение  $^{235}\text{U}$  велико).

В таких реакторах уран растворен в некоторой жидкости. Реактор на быстрых нейтронах обладает несколькими уникальными свойствами одновременно. В нем может одновременно осуществляться:

- Выделение энергии;
- Нарботка нового горючего;
- Выжигание отходов.

### 7.3. Движение частицы в периодическом потенциале

Рассмотрим еще один случай решения волнового уравнения. При рассмотрении металлов в курсе общей физики (электричество) рассматривалась модель свободных электронов в металле.

Кажется странным, что существует возможность с некоторой точностью описать движение электронов в металле как свободных частиц, хотя металл имеет кристаллическую решетку.

Пусть потенциал  $V(x)$  таков, что

$$V(x + a) = V(x), \quad -\infty < x < +\infty,$$

то есть существует бесконечный периодический потенциал (см. рис. 7.14).

Будем считать, что в точках

$$A_i, A_{i+1}, \dots, A_n, \dots$$

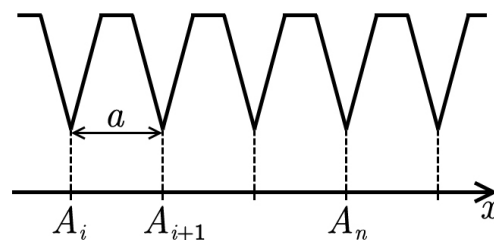


Рис. 7.14.

находятся ядра, а длину кристалла примем равной бесконечности (то есть значительно большей чем период решетки  $a$ ).

При некоторой энергии  $E$  существуют два решения

$$\varphi_1(x), \quad \varphi_2(x). \quad (7.5)$$

Волновое уравнение имеет следующий вид:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi, \quad (7.6)$$

где  $\hat{H}$  содержит периодический потенциал.

Поддействуем на обе части волнового уравнения **оператором сдвига**  $\hat{T}_a$ , действие которого заключается в следующем:

$$\hat{T}_a f(x) = f(x + a).$$

В этом случае действие оператора  $\hat{T}_a$  на  $\hat{H}$  не изменит гамильтониан  $\hat{H}$ , поскольку потенциал периодический. Следовательно, уравнение (7.6) примет следующий вид:

$$\hat{H}\Psi(x + a) = E\Psi(x + a).$$

Это означает, что если  $\Psi(x)$  — решение уравнения (7.6), то  $\Psi(x + a)$  — также решение уравнения (7.6).

Решений должно существовать всего два, поэтому некоторая функция  $\varphi_1(x + a)$ , которая является решением, должна быть линейной комбинацией базисных решений (7.5) с некоторыми коэффициентами:

$$\varphi_1(x + a) = \alpha_{11}\varphi_1(x) + \alpha_{12}\varphi_2(x). \quad (7.7)$$

Функция  $\varphi_2(x + a)$  также является решением. Следовательно, она должна быть суперпозицией базисных решений

$$\varphi_2(x + a) = \alpha_{21}\varphi_1(x) + \alpha_{22}\varphi_2(x). \quad (7.8)$$

Выражения (7.7), (7.8) можно записать в матричном виде следующим образом:

$$\begin{pmatrix} \varphi_1(x+a) \\ \varphi_2(x+a) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_1(x) \\ \varphi_2(x) \end{pmatrix}$$

Для сокращения выкладок условимся в дальнейшем считать, что если функции  $\varphi_1(x)$  и  $\varphi_2(x)$  записаны без аргументов, то аргументом этих функций является переменная  $x$ .

Построим такое решение, чтобы

$$\varphi(x+a) = \lambda \varphi(x), \quad (7.9)$$

то есть чтобы результатом действия оператора сдвига на функцию была та же самая функция, но с некоторым множителем  $\lambda$ .

Будем искать  $\varphi(x)$  в следующем виде:

$$\varphi(x) = C_1 \varphi_1(x) + C_2 \varphi_2(x).$$

В этом случае выражение (7.9), согласно (7.7), (7.8), примет следующий вид:

$$\begin{aligned} \varphi(x+a) &= C_1 \varphi_1(x+a) + C_2 \varphi_2(x+a) = \\ &= C_1(\alpha_{11} \varphi_1 + \alpha_{12} \varphi_2) + C_2(\alpha_{21} \varphi_1 + \alpha_{22} \varphi_2) = \lambda(C_1 \varphi_1 + C_2 \varphi_2). \end{aligned}$$

Получилось уравнение для постоянных  $C_1$  и  $C_2$ , которое распадается на систему двух уравнений. Приравнявая значения при  $\varphi_1$  получим следующее уравнение:

$$(\alpha_{11} - \lambda)C_1 + \alpha_{21}C_2 = 0, \quad (7.10)$$

а приравнявая значения при  $\varphi_2$  получим второе уравнение:

$$\alpha_{12}C_1 + (\alpha_{22} - \lambda)C_2 = 0. \quad (7.11)$$

Уравнения (7.10), (7.11) вместе составляют систему, из которой возможно определить значения  $C_1$  и  $C_2$ .

Тривиальное решение

$$C_1 = 0, \quad C_2 = 0,$$

очевидно, существует всегда.

Из курса линейной алгебры известно, что нетривиальное решение системы линейных однородных уравнений (7.10), (7.11) будет существовать только в том случае, если детерминант системы равен нулю, то есть:

$$\begin{aligned} \begin{vmatrix} \alpha_{11} - \lambda & \alpha_{21} \\ \alpha_{12} & \alpha_{22} - \lambda \end{vmatrix} &= \lambda^2 - \lambda(\alpha_{11} + \alpha_{22}) + \alpha_{11}\alpha_{22} - \alpha_{21}\alpha_{12} = \\ &= \lambda^2 - \lambda(\alpha_{11} + \alpha_{22}) + \begin{vmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{21} \\ \alpha_{12} & \alpha_{22} \end{vmatrix} = 0 \end{aligned} \quad (7.12)$$

В курсе дифференциальных уравнений было доказано (и на прошлой лекции был указан способ доказательства, аналогичный выводу для плотности потока вероятности), что определитель Вронского — постоянная величина, поэтому

$$\begin{vmatrix} \varphi'_1(x+a) & \varphi_1(x+a) \\ \varphi'_2(x+a) & \varphi_2(x+a) \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \varphi'_1(x) & \varphi_1(x) \\ \varphi'_2(x) & \varphi_2(x) \end{vmatrix}$$

С другой стороны, согласно (7.7), (7.8), определитель Вронского может быть выражен следующим образом:

$$\begin{vmatrix} \varphi_1'(x+a) & \varphi_1(x+a) \\ \varphi_2'(x+a) & \varphi_2(x+a) \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{21} \\ \alpha_{12} & \alpha_{22} \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} \varphi_1'(x) & \varphi_1(x) \\ \varphi_2'(x) & \varphi_2(x) \end{vmatrix}$$

Из этих двух выражений, очевидно, следует, что

$$\begin{vmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{21} \\ \alpha_{12} & \alpha_{22} \end{vmatrix} = 1.$$

Таким образом, согласно (7.12), получающееся квадратное уравнение относительно  $\lambda$  примет следующий вид:

$$\lambda^2 - \lambda(\alpha_{11} + \alpha_{12}) + 1 = 0. \quad (7.13)$$

Если

$$|\lambda| > 1,$$

то, сдвигая все дальше и дальше вправо будем получать все более растущую волновую функцию.

И наоборот, если

$$|\lambda| < 1,$$

то, сдвигая все дальше и дальше влево, опять получим растущую с каждым шагом волновую функцию, ненормируемую даже с помощью векторов состояния.

Таким образом, чтобы избежать роста волновой функции в геометрической прогрессии как в сторону увеличения координаты  $x$ , так и в сторону ее уменьшения, необходимо, чтобы

$$|\lambda| = 1.$$

Это означает, что величина  $\lambda$  может быть представлена в следующем виде:

$$\lambda_1 = e^{i\alpha}.$$

Если второе решение

$$\lambda_2 = e^{-i\alpha},$$

то, согласно теореме Виета,

$$\lambda_1 \lambda_2 = e^{i\alpha} e^{-i\alpha} = 1 = c,$$

где  $c$  — коэффициент при свободном члене в уравнении (7.13).

По этой же теореме Виета,

$$\lambda_1 + \lambda_2 = 2 \cos \alpha = \alpha_{11}(E) + \alpha_{22}(E),$$

а так как

$$-1 \leq \cos \alpha \leq 1,$$

то должно выполняться следующее правило:

$$-1 \leq \frac{\alpha_{11}(E) + \alpha_{22}(E)}{2} = \cos \alpha \leq 1 \quad (7.14)$$

Это неравенство означает, что энергия  $E$  будет лежать внутри некоторой области, то есть будет существовать некоторая полоса разрешенных энергий (см. рис. 7.15),

$$E_1^* \leq E \leq E_2^*,$$

причем возможно существование нескольких таких областей (см. рис. 7.16).

Если разрешить неравенство (7.14) (то есть решить уравнение Шредингера и найти коэффициенты  $\alpha_{11}(E)$  и  $\alpha_{22}(E)$ ), то можно выразить энергию через  $\cos \alpha$

$$E = f(\cos \alpha), \quad (7.15)$$

то есть четная функция величины  $\alpha$ .

Функция  $\varphi(x)$ , сдвинутая на  $n$  периодов решетки, примет следующий вид:

$$\varphi(x + na) = (e^{i\alpha})^n \varphi(x) = e^{i\alpha n} \varphi(x) = e^{i\frac{\alpha}{a}na} \varphi(x), \quad n \in \mathbb{Z}. \quad (7.16)$$

Обозначим

$$\frac{\alpha}{a} = q.$$

В этом случае условию (7.16) удовлетворяет следующая функция:

$$\varphi(x) = e^{iqx} U(x), \quad (7.17)$$

где  $U(x)$  — периодическая функция, то есть

$$U(x + a) = U(x).$$

Функция  $U(x)$  может зависеть от величины  $q$  и номера полосы  $j$  (см. рис. 7.16):

$$U(x) = U_{q,j}(x).$$

Энергия в этом случае, согласно (7.15), будет являться некоторой четной функцией от  $q^2$ :

$$E = f_j(q^2).$$

Функция  $\varphi(x)$ , определяемая выражением (7.17) — модулированная периодическая функция (периодическая волна), а энергия — четная функция, зависящая от  $q^2$ .

Следовательно, разложив по  $q^2$ , получим следующее соотношение:

$$E \simeq f_0 + r q^2,$$

где  $r$  — некоторый коэффициент.

Воспользовавшись правилом размерности для коэффициента  $r$ , получим следующую запись для энергии  $E$ :

$$E \simeq f_0 + \frac{\hbar^2 q^2}{2m^*},$$

в которой второй член, фактически, представляет собой кинетическую энергию свободного электрона с волновым вектором  $q$ .

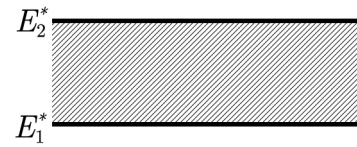


Рис. 7.15.

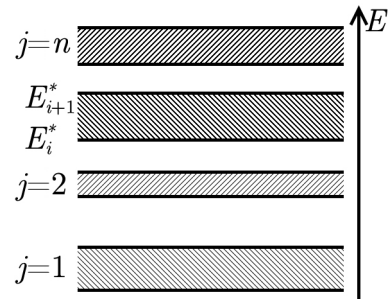


Рис. 7.16.

Таким образом, в периодическом потенциале возможны полосы разрешенных энергий. Вид зависимости  $E(q)$  представлен на рисунке 7.17.

Поскольку величина  $\alpha$ :

$$-\pi \leq \alpha \leq \pi \Rightarrow -\frac{\pi}{a} \leq q \leq \frac{\pi}{a}.$$

В начальной разрешенной полосе, в которой энергия меняется от  $E_1^*$  до  $E_2^*$  зависимость от  $q$  может быть представлена кривой (1). В следующей полосе, как правило, эта зависимость представлена уже кривой (2), то есть коэффициент

$$\frac{\hbar^2}{2m^*}$$

может быть как положительным, так и отрицательным.

В действительности, если рассматривать конечный периодический потенциал (решетку конечной длины), можно увидеть, что полоса, в которой содержатся уровни, имеет конечное число подуровней.

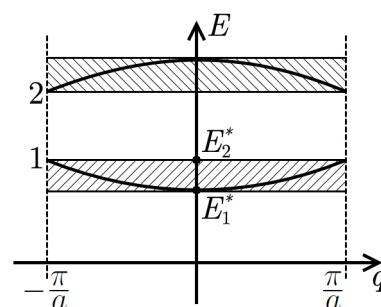


Рис. 7.17.

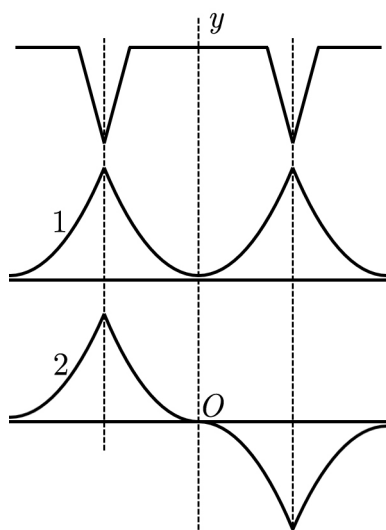


Рис. 7.18.

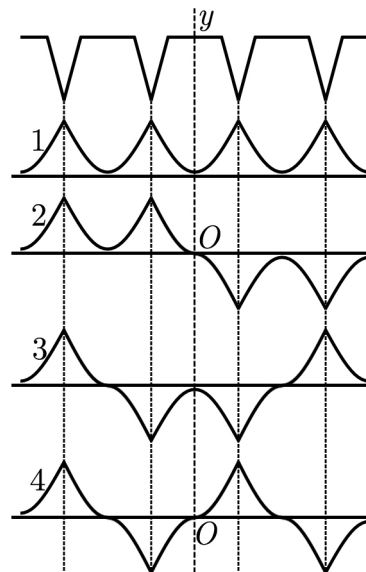


Рис. 7.19.

Рассмотрим вначале решетку, состоящую из двух  $\delta$ -функций (см. рис. 7.18). Существуют два решения: решение (1), симметричное относительно некоторой оси  $y$ , обладает меньшей энергией по сравнению с решением (2), симметричным относительно точки  $O$ .

Напомним, что в утверждение осцилляционной теоремы состоит в том, что первый по энергии уровень соответствует волновой функции, не имеющей нулей, второй — волновой функции, имеющей один ноль, и т.д. Для четырех  $\delta$ -функций существуют, соответственно, четыре возможных решения (см. рис. 7.19).

- Низшее по энергии, не имеющее нулей (кривая (1) на рис. 7.19);
- Более высокое по энергии, волновая функция которого имеет ровно один ноль (кривая (2));

- Еще более высокое по энергии, соответствующее существованию двух нулей волновой функции (кривая (3));
- Высшее по энергии (кривая (4) на рисунке 7.19). В этом случае существуют три нуля волновой функции.

Расстояние между уровнями (в случае двух  $\delta$ -функций) определяется затуханием уровня до значения второго потенциала, то есть экспоненциально мало.

Для периодического потенциала, состоящего из четырех  $\delta$ -функций существовала бы полоса, в которой содержалось бы четыре уровня (см. рис. 7.20).

Если существует потенциал, состоящий из  $n$  периодических  $\delta$ -функций, то в полосе будет существовать  $n$  уровней. При устремлении

$$n \rightarrow +\infty$$

все  $n$  уровней сольются в одну полосу, что и было получено ранее для бесконечного периодического потенциала.

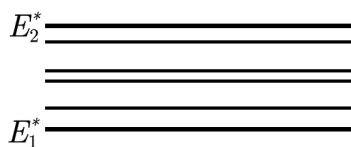


Рис. 7.20.

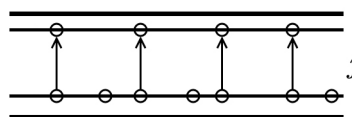


Рис. 7.21.

Диэлектрик отличается от металла тем, что в диэлектрике для электронов имеется не  $n$  состояний в полосе, а в два раза больше. Дополнительные  $n$  состояний появляются в связи с тем, что спин электрона

$$s = \frac{1}{2}.$$

Если в металле один из верхних уровней в полосе заполнен только наполовину, то при приложении внешнего поля на этот уровень могут попадать электроны, создавая при этом ток (см. рис. 7.21). Величина  $q$  при этом меняет знак на противоположный.

Таким образом, можно заключить, что металлы находятся в состояниях, где уровни в полосе заполнены не полностью.

В диэлектриках полосы заполнены полностью, поэтому переход из одного уровня в другой невозможен — все места уже заняты. Л.В. Келдыш обнаружил, что в очень сильных полях возможен подбарьерный переход электронов из одной полосы в другую. Пользуясь этим эффектом можно создать, например, диоды.

Если в кристалле, кроме некоторой полосы, имеется примесь, то возможно существование либо ниже основной полосы, либо выше нее дополнительной полосы, связанной с примесью (см. рис. 7.22).

Из нижней полосы (1) возможен переход в пустую полосу, где нет электронов: такой полупроводник называется **донорным**. Из заполненной полосы возможен переход в пустую верхнюю полосу (2), такой полупроводник называется **акцепторным**.

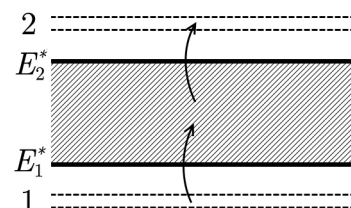


Рис. 7.22.

Современная наука о твердом теле основана на сходной модели. При построении этой модели требуется, во-первых, рассмотреть трехмерный случай, а во вторых — учесть симметрию кристалла.



**Пример 7.4.** Кристалл водорода — молекулярный кристалл. Этот кристалл слабо-связанный, молекулы удерживаются силами Ван-дер-Ваальса.

Если к кристаллу водорода приложить большое давление, то в нем происходят фазовые переходы, в результате чего возникает кристаллическая решетка другого типа с большим количеством состояний.

В атоме водорода существует один валентный электрон. Если создать кристалл атома водорода, в котором будет существовать только один валентный электрон во внешней полосе, то эта полоса будет заполнена только наполовину, что соответствует металлу.

Следовательно, если оказать очень большое давление на водород, в результате должен появиться металлический водород.

Современной науке до сих пор не удалось ни осуществить этот эффект, ни рассчитать необходимое для его осуществления давление. Ученые полагают, что металлический водород должен находиться в метастабильном состоянии наподобие того, в каком состоянии находится алмаз, полученный из графита.

Существуют предположения, что металлический водород будет обладать также и сверхпроводящими свойствами. Техническое применение этого кристалла приведет в таком случае к поразительным успехам во многих областях науки и техники.