Рух частинки в полі двох «дельта-ям»

Розглянемо в якості прикладу розв'язок рівняння Шредінгера (РШ) в координатному зображенні для квантової частинки, яка рухається в полі двох дельта ям $U(x) = -\alpha\left[\delta(x)+\delta(x-a)\right]$ (див. рис. 1)

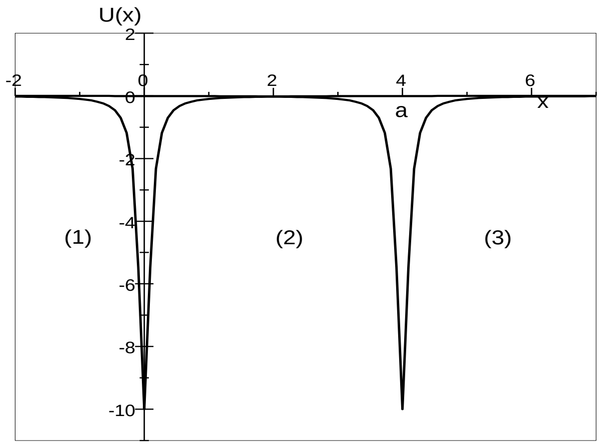


Рис.1. Схематичне зображення потенціальної енергії $U(x) = -\alpha\left[\delta(x)+\delta(x-a)\right]$

Розглянемо одновимірне стаціонарне рівняння Шредінгера (РШ)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x)+U(x)\psi(x)=E\psi \tag{1.1}$$

Залежно від знаку енергії E рух частинки може бути як фінітним при $E<0$, так і інфінітним при $E>0$. При $E<0$ частинка знаходиться в зв'язаному стані (локалізована поблизу ями) з від'ємною енергією $\varepsilon = -|E|$.

<u>Розв'язок для від'ємних енергій.</u>

Розглянемо спочатку ***<u>від'ємні енергії</u>*** $E<0$. РШ в цьому випадку має вигляд:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x)-\alpha\left(\delta(x)+\delta(x-a)\right)\psi(x)=-|E|\psi \tag{1.2}$$

Одразу підставили в рівняння вираз для потенціальної енергії і врахували, що зв'язані (локалізовані) стани в цьому випадку повинні мати від'ємні енергії. Хвильова функція (ХФ) визначатиметься різними аналітичними виразами в трьох областях: $1.\, x\le 0;\quad 2.\, 0\le x\le a;\quad 3.\, x\ge a$.

Так як дельта-функції $\delta(x)$ і $\delta(x-a)$ відрізняються від нуля тільки в точках $x=0,\, x=a$, то РШ (1.2) при $x\ne 0,\, x\ne a$ матиме вигляд

$$\psi''-\kappa^2\psi(x)=0, \tag{1.3}$$

де $\kappa^2 = \dfrac{2m|E|}{\hbar^2}$.

Визначимо граничні умови для рівняння (1.3). Як відомо, хвильова функція завжди є неперервною. З рівняння (1.2) видно, що в особливих точках $x=0, x=a$ друга похідна від хвильової функції зазнає нескінченних розривів. Це означає, що в першій похідній в цих точках є скінченні скачки. Визначимо їх. Дельта-функції $\delta(x)$ и $\delta(x-a)$ дають внесок тільки в граничні умови, котрі визначають скачки першої похідної від хвильової функції в точках $x=0, x=a$.

Знак енергії E не має значення при виведенні граничних умов в точках $x=0, x=a$!

Проінтегруємо (1.2) спочатку біля точки $x=0$ від $-\varepsilon$ до $+\varepsilon$

$$\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} -\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x)dx - \alpha\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}\delta(x)\psi(x)dx = E\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}\psi dx;$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'(x)\Big|_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} - \alpha\psi(0) = E\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}\psi dx;$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\psi'(+\varepsilon)-\psi'(-\varepsilon)\right] - \alpha\psi(0) = E\left[F(+\varepsilon)-F(-\varepsilon)\right].$$

Перейдемо до границі $\varepsilon \to +0$. Через неперервність хвильової функції $F(+0)=F(-0)=F(0)$, а скачок першої похідної від хвильової функції дорівнює

$$\psi_2'(+0)-\psi_1'(-0) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\psi(0).$$

Аналогічно знайдемо скачок першої похідної в точці $x=a$. Проінтегруємо рівняння (1.2) біля точки $x=a$.

$$\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} -\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x)dx - \alpha\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon}\delta(x-a)\psi(x)dx = E\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon}\psi dx;$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'(x)\Big|_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} - \alpha\psi(a) = E\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon}\psi dx;$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\psi'(a+\varepsilon)-\psi'(a-\varepsilon)\right] - \alpha\psi(a) = E\left[F(a+\varepsilon)-F(a-\varepsilon)\right];$$

$$F(a+0)=F(a-0)=F(a).$$

Таким чином, скачок першої похідної в точці $x=a$ дорівнює

$$\psi_3'(a+0)-\psi_2'(a-0) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\psi(a).$$

Напишемо отримані граничні умови в точках 0 та a

$$\begin{aligned}
&\psi_2(+0)=\psi_1(-0);\\
&\psi_2'(+0)-\psi_1'(-0)=-\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\psi(0);\\
&\psi_3(a+0)=\psi_2(a-0);\\
&\psi_3'(a+0)-\psi_2'(a-0)=-\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\psi(a).
\end{aligned} \tag{1.4}$$

Слід врахувати також умови обмеженості хвильової функції при $x\to\pm\infty$. Це ще дві додаткові граничні умови. Усього є 6 граничних умов:

$$\begin{aligned}
&\psi_1(x\to-\infty)-\text{обмежена};\\
&\psi_3(x\to+\infty)-\text{обмежена};\\
&\psi_2(+0)=\psi_1(-0);\\
&\psi_2'(+0)-\psi_1'(-0)=-\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\psi(0);\\
&\psi_3(a+0)=\psi_2(a-0);\\
&\psi_3'(a+0)-\psi_2'(a-0)=-\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\psi(a).
\end{aligned} \tag{1.5}$$

Як вже зазначалося, хвильова функція визначається трьома різними аналітичними виразами в трьох областях $1.\ x\le 0;\quad 2.\ 0\le x\le a;\quad 3.\ x\ge a$.

Два частинних лінійно незалежних розв'язки рівняння (1.3) – це $e^{\pm\kappa x}$. Загальний розв'язок є лінійною комбінацією $Ae^{\kappa x}+Be^{-\kappa x}$. Коефіцієнти є різними в трьох областях:

$$\psi_1(x)=A_1e^{\kappa x}+B_1e^{-\kappa x},\quad B_1=0 \text{ (з умови обмеженості ХФ при } x\to-\infty)$$
$$\psi_2(x)=A_2e^{\kappa x}+B_2e^{-\kappa x}$$
$$\psi_3(x)=A_3e^{\kappa(x-a)}+B_3e^{-\kappa(x-a)},\ A_3=0 \text{ (з умови обмеженості ХФ при } x\to+\infty)$$

Таким чином, чотири коефіцієнти A_1, A_2, B_2, B_3 хвильової функції

$$\begin{aligned}
&\psi_1=A_1e^{\kappa x};\\
&\psi_2=A_2e^{\kappa x}+B_2e^{-\kappa x};\\
&\psi_3=B_3e^{-\kappa(x-a)}.
\end{aligned} \tag{1.6}$$

зв'язані чотирма граничними умовами (1.4)

При $x=0$ $\begin{cases} A_2+B_2=A_1; \\ \kappa(A_2-B_2-A_1)=-\dfrac{2m\alpha}{\hbar^2}A_1; \end{cases}$. Звідси: $\begin{cases} A_2=\left(1-\dfrac{m\alpha}{\hbar^2\kappa}\right)A_1; \\ B_2=\dfrac{m\alpha}{\hbar^2\kappa}A_1. \end{cases}$

При $x=a$ $\begin{cases} A_2e^{\kappa a}+B_2e^{-\kappa a}=B_3; \\ \kappa(-B_3-A_2e^{\kappa a}+B_2e^{-\kappa a})=-\dfrac{2m\alpha}{\hbar^2}B_3; \end{cases}$

або $\begin{cases} A_2+B_2=A_1; \\ A_2-B_2=\left(1-\dfrac{2m\alpha}{\hbar^2\kappa}\right)A_1; \end{cases}$ Звідси: $\begin{cases} A_2=\dfrac{m\alpha}{\hbar^2 k}e^{-\kappa a}B_3; \\ B_2=\left(1-\dfrac{m\alpha}{\hbar^2\kappa}\right)e^{\kappa a}B_3. \end{cases}$

Таким чином, ми визначили зв'язок між коефіцієнти A_1, B_3 в областях 1 і 3:

$$A_2=\left(1-\frac{m\alpha}{\hbar^2\kappa}\right)A_1=\frac{m\alpha}{\hbar^2\kappa}e^{-\kappa a}B_3;$$
$$B_2=\frac{m\alpha}{\hbar^2\kappa}A_1=\left(1-\frac{m\alpha}{\hbar^2\kappa}\right)e^{\kappa a}B_3.$$

Ці коефіцієнти визначаються системою двох лінійних однорідних алгебраїчних рівнянь з двома невідомими A_1, B_3

$$\begin{cases} \left(1-\dfrac{m\alpha}{\hbar^2\kappa}\right)A_1-\dfrac{m\alpha}{\hbar^2 k}e^{-\kappa a}B_3=0; \\ \dfrac{m\alpha}{\hbar^2\kappa}A_1-\left(1-\dfrac{m\alpha}{\hbar^2\kappa}\right)e^{\kappa a}B_3=0; \end{cases} \quad (1.7)$$

Така система має нетривіальні розв'язки за умови рівності нулю її детермінанта

$$\begin{vmatrix} \left(1-\dfrac{m\alpha}{\kappa\hbar^2}\right) & -\dfrac{m\alpha}{\kappa\hbar^2}e^{-\kappa a} \\ \dfrac{m\alpha}{\kappa\hbar^2} & -\left(1-\dfrac{m\alpha}{\kappa\hbar^2}\right)e^{\kappa a} \end{vmatrix}=0. \quad (1.8)$$

З рівняння (2.7) знаходимо дисперсійне співвідношення для визначення рівнів енергії

$$\frac{\hbar^2\kappa}{m\alpha}-1=\pm e^{-\kappa a}, \quad (1.9)$$

а з рівнянь (1.8) и (1.9) - співвідношення між A_1, B_3

$$B_3=\pm A_1e^{-\kappa a}.$$

Введемо позначення: $y = \kappa a, \quad y_0 = \dfrac{m\alpha a}{\hbar^2}$. В нових змінних рівняння (1.9) матиме вигляд

$$\frac{y}{y_0} - 1 = \pm e^{-y}. \tag{1.10}$$

Графічний розв'язок рівнянь (1.10) представлено на рис. 2.

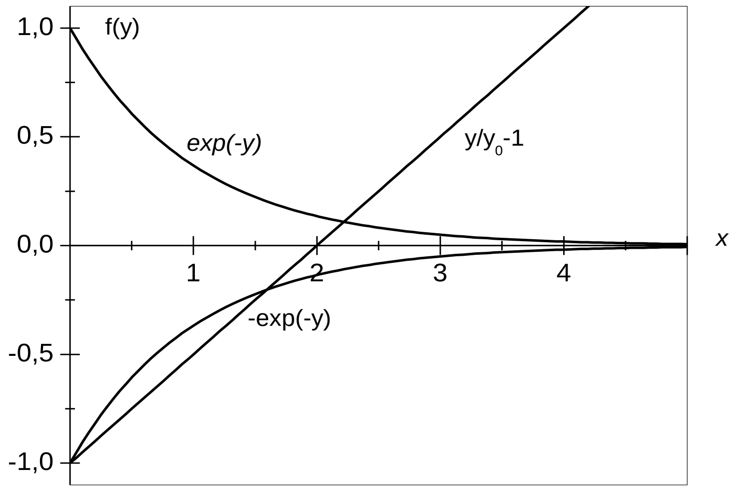


Рис.2. Графічний розв'язок рівнянь (1.9) при $a = 5, m = 1, \alpha = 10, \hbar = 1.$

Як видно з рисунка, рівняння $\dfrac{y}{y_0} - 1 = +e^{-y}$ завжди має один розв'язок, а рівняння $\dfrac{y}{y_0} - 1 = -e^{-y}$ має розв'язок $y \neq 0$ тільки при виконанні умови $y_0 > 1$, тобто при

$$m\alpha a > \hbar^2.$$

Нижче приведені нормовані на одиницю хвильові функції (2.5) (см. рис. 3).

$$\begin{cases} \psi_1 = \sqrt{\dfrac{\kappa}{2}} \dfrac{1}{\sqrt{1 \pm e^{-\kappa a}\left(1+\kappa a\right)}} e^{\kappa x}, x \le 0; \\ \psi_2 = \sqrt{\dfrac{k}{2}} \dfrac{1}{\sqrt{1 \pm e^{-\kappa x}\left(1+\kappa a\right)}} \left(\pm e^{\kappa(x-a)} + e^{-\kappa x}\right), 0 \le x \le a; \\ \psi_3 = \pm\sqrt{\dfrac{\kappa}{2}} \dfrac{1}{\sqrt{1 \pm e^{-\kappa x}\left(1+\kappa a\right)}} e^{-\kappa(x-a)}, x \ge a. \end{cases} \tag{1.11}$$

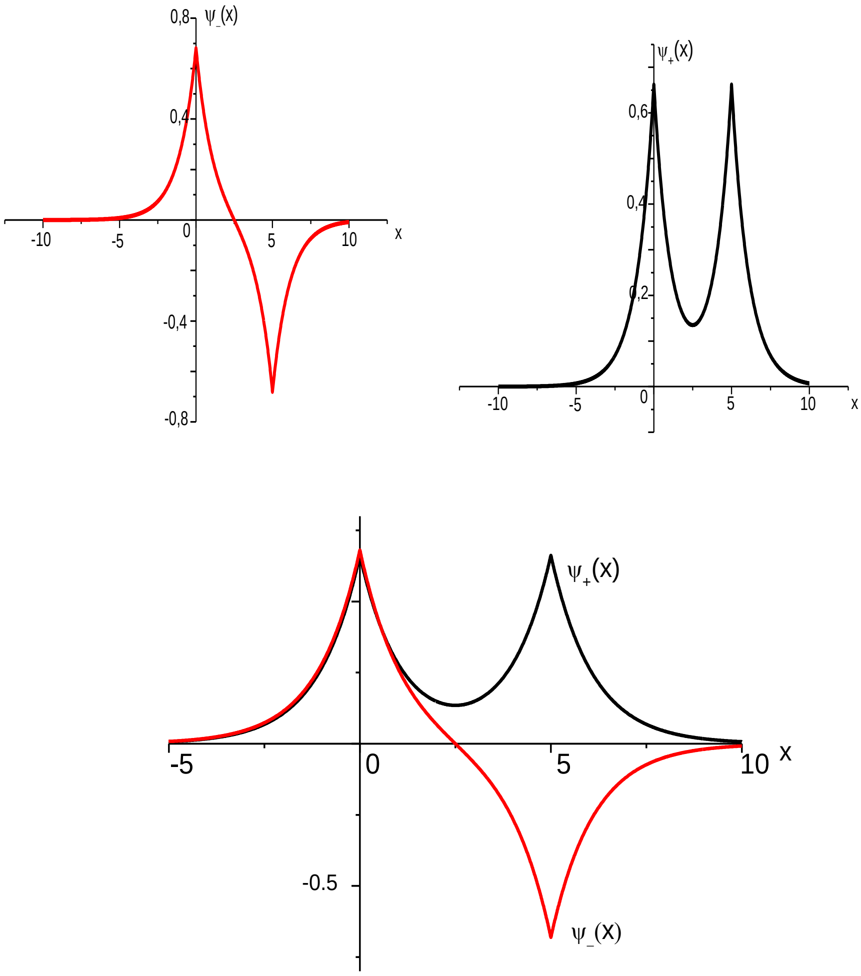


Рис. 3. Хвильові функції (1.11) при $a = 5, m = 1, \alpha = 10, \hbar = 1$

Розв'язок для додатних енергій.

Розглянемо випадок $E > 0$, котрий відповідає надбар'єрному відбиттю. Для додатних енергій РШ (1.1) при $x \neq 0, x \neq a$ має вигляд

$$\psi'' + k^2\psi\left(x\right) = 0; \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}. \tag{1.12}$$

з граничними умовами (1.5) для хвильової функції. Нагадаємо їх

$$\begin{aligned}
&\psi_1\left(x \to -\infty\right) - \text{обмежена};\\
&\psi_3\left(x \to +\infty\right) - \text{обмежена};\\
&\psi_2\left(+0\right) = \psi_1\left(-0\right);\\
&\psi_2'\left(+0\right) - \psi_1'\left(-0\right) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\psi\left(0\right);\\
&\psi_3\left(a+0\right) = \psi_2\left(a-0\right);\\
&\psi_3'\left(a+0\right) - \psi_2'\left(a-0\right) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\psi\left(a\right).
\end{aligned}$$

Два частинних лінійно незалежних розв'язки рівняння (1.12) – це $e^{\pm ikx}$. Загальний розв'язок є лінійною комбінацією $Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$. Коефіцієнти є різними в трьох областях:

$$\begin{aligned}
\psi_1\left(x\right) &= A_1e^{ikx} + B_1e^{-ikx},\\
\psi_2\left(x\right) &= A_2e^{ikx} + B_2e^{-ikx}\\
\psi_3\left(x\right) &= A_3e^{ik(x-a)} + B_3e^{-ik(x-a)},
\end{aligned}$$

Граничні умови на $x \to \pm\infty$ виконуються автоматично. 6 коефіцієнтів пов'язані лише 4 граничними умовами. Один з коефіцієнтів можна вважати рівним 0. Зручно покласти рівним нулю коефіцієнт B_3, який описує хвилю, що рухається зліва направо, тобто відсутній потік частинок справа $(B_3 = 0)$. При такому визначенні маємо

$$\begin{cases}
\psi_1 = \underset{\textit{падаюча}}{A_1e^{ikx}} + \underset{\textit{відбита}}{B_1e^{-ikx}};\\
\psi_2 = A_2e^{ikx} + B_2e^{-ikx};\\
\psi_3 = \underbrace{A_3e^{ik\left(x-a\right)}}_{\textit{прошедша}}.
\end{cases} \tag{1.13}$$

Підкреслимо ще раз, що в формулах (1.13) ми припустили, що нема потоку частинок справа, тому в третій області є тільки хвиля, яка пройшла. Відшукаємо зв'язок між коефіцієнтами A_3, B_1 та A_1. Вони пов'язані через коефіцієнти проміжної області A_2, B_2

При $x = 0$
$$\begin{cases} A_2 + B_2 = A_1 + B_1; \\ ik(A_2 - B_2 - A_1 + B_1) = -\dfrac{2m\alpha}{\hbar^2}(A_1 + B_1); \end{cases}.$$

або
$$\begin{cases} A_2 + B_2 = A_1 + B_1; \\ A_2 - B_2 = \left(1 - \dfrac{2m\alpha}{ik\hbar^2}\right)A_1 - \left(1 + \dfrac{2m\alpha}{ik\hbar^2}\right)B_1; \end{cases}$$

Звідси:
$$\begin{cases} A_2 = \left(1 - \dfrac{m\alpha}{ik\hbar^2}\right)A_1 - \dfrac{m\alpha}{ik\hbar^2}B_1; \\ B_2 = \dfrac{m\alpha}{ik\hbar^2}A_1 + \left(1 + \dfrac{m\alpha}{ik\hbar^2}\right)B_1. \end{cases} \tag{1.14}$$

При $x = a$
$$\begin{cases} A_2 e^{ika} + B_2 e^{-ika} = A_3; \\ ik(A_3 - A_2 e^{ika} + B_2 e^{-ika}) = -\dfrac{2m\alpha}{\hbar^2}A_3; \end{cases}$$
або
$$\begin{cases} A_2 e^{ika} + B_2 e^{-ika} = A_3; \\ A_2 e^{ika} - B_2 e^{-ika} = \left(1 + \dfrac{2m\alpha}{ik\hbar^2}\right)A_3; \end{cases}$$

Звідси:
$$\begin{cases} A_2 = \left(1 + \dfrac{m\alpha}{ik\hbar^2}\right)e^{-ika}A_3; \\ B_2 = -\dfrac{m\alpha}{ik\hbar^2}e^{ika}A_3. \end{cases} \tag{1.15}$$

З (1.14) та (1.15) отримаємо зв'язок між амплітудами відбитої хвилі B_1, хвилі, що пройшла A_3 та падаючої хвилі A_1
$$\begin{cases} \left(1 - \dfrac{m\alpha}{ik\hbar^2}\right)A_1 - \dfrac{m\alpha}{ik\hbar^2}B_1 = \left(1 + \dfrac{m\alpha}{ik\hbar^2}\right)e^{-ika}A_3; \\ \dfrac{m\alpha}{ik\hbar^2}A_1 + \left(1 + \dfrac{m\alpha}{ik\hbar^2}\right)B_1 = -\dfrac{m\alpha}{ik\hbar^2}e^{ika}A_3. \end{cases} \tag{1.16}$$

$$\begin{cases} \left(1-\frac{m\alpha}{ik\hbar^2}\right)A_1 - \frac{m\alpha}{ik\hbar^2}B_1 = \left(1+\frac{m\alpha}{ik\hbar^2}\right)e^{-ika}A_3 \Big| \times \left(1+\frac{m\alpha}{ik\hbar^2}\right) \\ \frac{m\alpha}{ik\hbar^2}A_1 + \left(1+\frac{m\alpha}{ik\hbar^2}\right)B_1 = -\frac{m\alpha}{ik\hbar^2}e^{ika}A_3 \Big| \times \left(\frac{m\alpha}{ik\hbar^2}\right) \end{cases}$$

$$\underbrace{\left[\left(1-\frac{m\alpha}{ik\hbar^2}\right)\left(1+\frac{m\alpha}{ik\hbar^2}\right)+\left(\frac{m\alpha}{ik\hbar^2}\right)^2\right]}_{=1}A_1 = \left[\left(1+\frac{m\alpha}{ik\hbar^2}\right)^2 e^{-ika} - \left(\frac{m\alpha}{ik\hbar^2}\right)^2 e^{ika}\right]A_3;$$

Коефіцієнт A_3 виражається через A_1 наступним чином

$$A_1 = \left[\left(1+\frac{m\alpha}{ik\hbar^2}\right)^2 e^{-ika} - \left(\frac{m\alpha}{ik\hbar^2}\right)^2 e^{ika}\right]A_3 = \left[\left(1-i\frac{m\alpha}{k\hbar^2}\right)^2 e^{-ika} + \left(\frac{m\alpha}{k\hbar^2}\right)^2 e^{ika}\right]A_3$$

або

$$A_3 = \frac{A_1}{\gamma^2 e^{ika} + (1-i\gamma)^2 e^{-ika}}; \quad \gamma = \frac{m\alpha}{k\hbar^2}. \tag{1.17}$$

З відомих формул для коефіцієнтів прозорості

$$D = \frac{|j_{transmited}|}{|j_{incident}|} = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} \tag{1.18}$$

та відбиття

$$R = \frac{|j_{reflected}|}{|j_{incident}|} = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2} \tag{1.19}$$

Знаходимо, наприклад, для коефіцієнта відбиття

$$D = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} = \frac{1}{|\gamma^2 e^{ika} + (1-i\gamma)^2 e^{-ika}|^2}.$$

Коефіцієнт відбиття знайдемо як $R = 1 - D.$

Перетворимо знаменник (виділимо дійсну та уявну частини):

$$\begin{aligned} \gamma^2 e^{ika} + (1-i\gamma)^2 e^{-ika} &= \gamma^2 e^{ika} + \left(1-2i\gamma-\gamma^2\right)e^{-ika} = \\ &= 2i\gamma^2 \sin ka + (1-2i\gamma)(\cos ka - i\sin ka) = \\ &= \cos ka - 2\gamma \sin ka + i\left(-\sin ka - 2\gamma\cos ka + 2\gamma^2 \sin ka\right) = \\ &= \cos ka - 2\gamma\sin ka + i\left[(2\gamma^2-1)\sin ka - 2\gamma\cos ka\right]. \end{aligned}$$

Розрахуємо квадрат модуля

$$|\gamma^2 e^{ika}+(1-i\gamma)^2 e^{-ika}|^2=(\cos ka-2\gamma\sin ka)^2+\left[(2\gamma^2-1)\sin ka-2\gamma\cos ka\right]^2=$$

$$=\cos^2 ka-\cancel{4\gamma\sin ka\cos ka}+4\gamma^2\sin^2 ka+(2\gamma^2-1)^2\sin^2 ka+$$

$$+4\gamma(\cancel{1}-2\gamma^2)\sin ka\cos ka+4\gamma^2\cos^2 ka=$$

$$=\cos^2 ka+4\gamma^2+(4\gamma^4-4\gamma^2+1)\sin^2 ka-8\gamma^3\sin ka\cos ka=$$

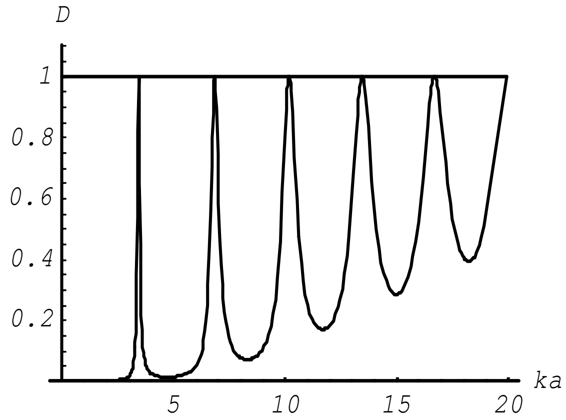
$$=1+4\gamma^2\underbrace{(1-\sin^2 ka)}_{\cos^2 ka}+4\gamma^4\sin^2 ka-8\gamma^3\sin ka\cos ka=$$

$$=1+4\gamma^2(\cos^2 ka-2\gamma\sin ka\cos ka+\gamma^2\sin^2 ka)=$$

$$=1+4\gamma^2(\cos ka-\gamma\sin ka)^2.$$

$$\begin{cases} D=\dfrac{1}{1+4\gamma^2(\cos ka-\gamma\sin ka)^2}; \\ R=\dfrac{4\gamma^2(\cos ka-\gamma\sin ka)^2}{1+4\gamma^2(\cos ka-\gamma\sin ka)^2}. \end{cases} \qquad (1.20)$$

З формул (1.20) видно, що при $\mathrm{tg}\,ka=\dfrac{k\hbar^2}{m\alpha}$ є повне проходження: $D=1,\quad R=0$. На рис. 4 представлені графіки залежності D та R від параметру *ka*.



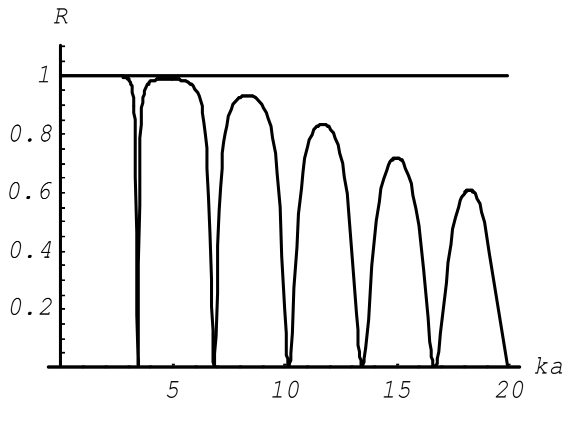


Рис. 4. Графіки коефіцієнтів прозорості та відбиття при $a = 5, m = 1, \alpha = 10, \hbar = 1.$