## Equation Chapter 1 Section 11.1 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 $U(x) = -\alpha(\delta(x) + \delta(x-a))$

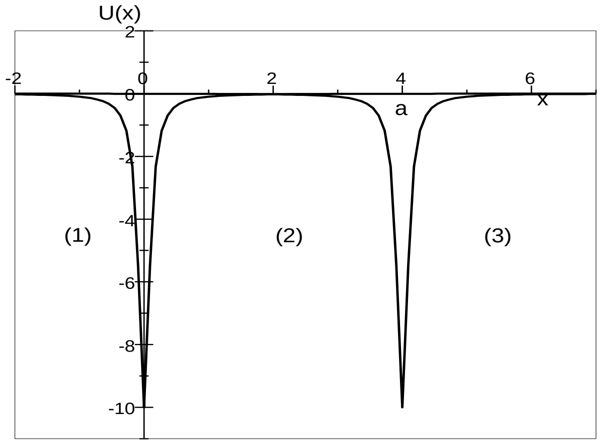


Рис.1. Схематичне зображення потенціальної енергії $U(x) = -\alpha(\delta(x) + \delta(x-a))$

***<u>Розв'язок</u>***

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 з енергією $\varepsilon = -|E|$.

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

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

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

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

$$\psi'' - k_0^2\psi(x) = 0, \tag{1.3}$$

де $k_0^2 = \dfrac{2m|E|}{\hbar^2}$.

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 $x=0, x=a$.

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

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

Запишемо всі отримані граничні умови

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

Слід врахувати також умову обмеженості хвильової функції при $x \to \pm\infty$. Як вже зазначалося, хвильова функція визначається трьома різними аналітичними виразами в трьох областях 1. $x \le 0$;   2. $0 \le x \le a$;   3. $x \ge a$

$$\begin{aligned}
&\psi_1(x) = A_1 e^{kx} + B_1 e^{-kx}, \quad B_1 = 0 (\text{з умови обмеженості ХФ})\\
&\psi_2(x) = A_2 e^{kx} + B_2 e^{-kx}\\
&\psi_3(x) = A_3 e^{k(x-a)} + B_3 e^{-k(x-a)}, \quad A_3 = 0 (\text{ з умови обмеженості ХФ})
\end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned}
&\psi_1 = A_1 e^{kx};\\
&\psi_2 = A_2 e^{kx} + B_2 e^{-kx}; \qquad (1.5)\\
&\psi_3 = B_3 e^{-k(x-a)}.
\end{aligned}$$

зв’язані чотирма граничними умовами (1.4)

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

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

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

$$\begin{aligned}
&A_2 = \left(1 - \frac{m\alpha}{\hbar^2 k}\right) A_1 = \frac{m\alpha}{\hbar^2 k} e^{-ka} B_3;\\
&B_2 = \frac{m\alpha}{\hbar^2 k} A_1 = \left(1 - \frac{m\alpha}{\hbar^2 k}\right) e^{ka} B_3.
\end{aligned}$$

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

$$\begin{cases} \left(1 - \dfrac{m\alpha}{\hbar^2 k}\right) A_1 - \dfrac{m\alpha}{\hbar^2 k} e^{-ka} B_3 = 0; \\ \dfrac{m\alpha}{\hbar^2 k} A_1 - \left(1 - \dfrac{m\alpha}{\hbar^2 k}\right) e^{ka} B_3 = 0; \end{cases} \qquad (1.6)$$

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

$$\begin{vmatrix} \left(1-\dfrac{m\alpha}{\hbar^2 k}\right) & -\dfrac{m\alpha}{\hbar^2 k}e^{-ka} \\ \dfrac{m\alpha}{\hbar^2 k} & -\left(1-\dfrac{m\alpha}{\hbar^2 k}\right)e^{ka} \end{vmatrix} = 0. \qquad (1.7)$$

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

$$\frac{\hbar^2 k}{m\alpha} - 1 = \pm e^{-ka}, \qquad (1.8)$$

а з рівнянь (1.7) и (1.8) - співвідношення між $A_1$, $B_3$

$$B_3 = \pm A_1 e^{-ka}.$$

Введемо позначення: $y = ka, \quad y_0 = \dfrac{m\alpha a}{\hbar^2}$. В нових змінних рівняння (1.8) матиме вигляд

$$\frac{y}{y_0} - 1 = \pm e^{-y}. \qquad (1.9)$$

Графічний розв'язок рівнянь (1.9) представлено на рис. 2.

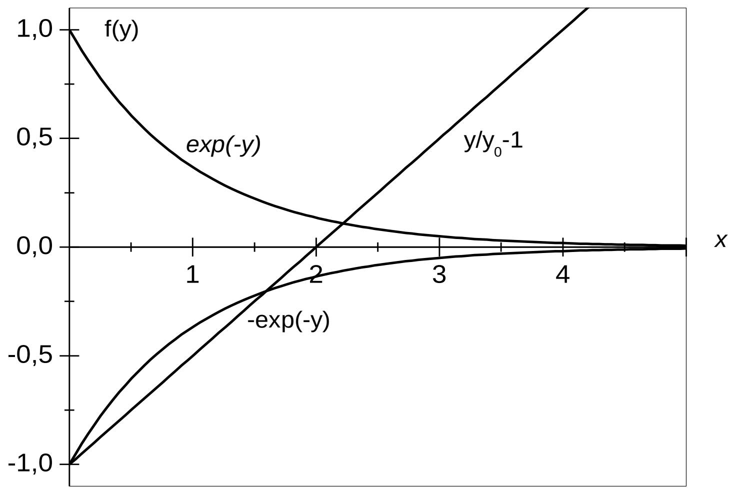


Рис.2. Графічний розв'язок рівнянь (1.9) при $a = 5, m = 1, \alpha = 10, \hbar = 1.$

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)

$$\begin{cases} \psi_1=\sqrt{\dfrac{k}{2}}\dfrac{1}{\sqrt{1\pm e^{-ka}\left(1+ka\right)}}\left(e^{kx}\pm e^{k(x-a)}\right), x\leq 0 \\ \psi_2=\sqrt{\dfrac{k}{2}}\dfrac{1}{\sqrt{1\pm e^{-kx}\left(1+ka\right)}}\left(\pm e^{k(x-a)}+e^{-kx}\right), 0\leq x\leq a \\ \psi_3=\pm\sqrt{\dfrac{k}{2}}\dfrac{1}{\sqrt{1\pm e^{-kx}\left(1+ka\right)}}\left(e^{-k(x-a)}\pm e^{-kx}\right), x\geq a \end{cases} \tag{1.10}$$

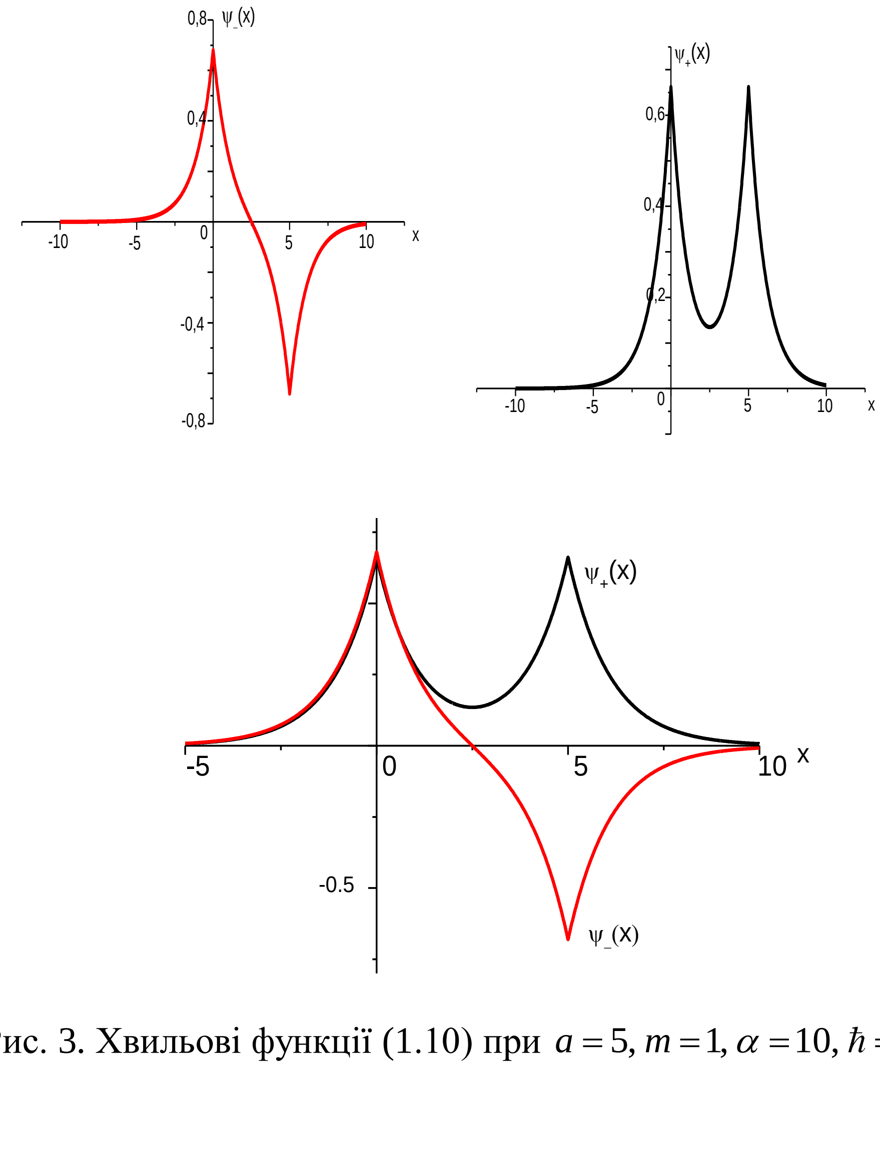


Рис. 3. Хвильові функції (1.10) при $a=5, m=1, \alpha=10, \hbar=1$

Розглянемо тепер випадок $E>0$, котрий відповідає надбар'єрному відбиттю. Для позитивних енергій РШ (2.1) при $x \neq 0, x \neq a$ має вигляд

$$\psi'' + k^2\psi(x) = 0; \quad \frac{2mE}{\hbar^2} = k^2 \tag{1.11}$$

з попередніми граничними умовами (1.4) для хвильової функції

$$\begin{cases} \psi_1 = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}; \\ \psi_2 = A_2 e^{ikx} + B_2 e^{-ikx}; \\ \psi_3 = A_3 e^{ik(x-a)}. \end{cases} \tag{1.12}$$

В формулах (1.12) ми припустили, що нема потоку частинок справа, тому в третій області є тільки хвиля, яка проходе. Коефіцієнти $A_3, B_1$ виражаються через $A_1$ наступним чином

$$A_3 = \frac{A_1}{\gamma^2 e^{ika} + (1-i\gamma)^2 e^{-ika}}; \quad \gamma = \frac{m\alpha}{k\hbar^2}. \tag{1.13}$$

З відомих формул для коефіцієнтів прозорості

$$D = \frac{|j_{transmited}|}{|j_{incidental}|} = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} \tag{1.14}$$

та відбиття

$$R = \frac{|j_{reflected}|}{|j_{incidental}|} = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2} \tag{1.15}$$

знаходимо

$$\begin{cases} D = \dfrac{1}{1+4\gamma^2(\cos ka - \gamma \sin ka)^2}; \\ R = \dfrac{4\gamma^2(\cos ka - \gamma \sin ka)^2}{1+4\gamma^2(\cos ka - \gamma \sin ka)^2}. \end{cases} \tag{1.16}$$

З формул (1.16) видно, що при $tg\, ka = \dfrac{k\hbar^2}{m\alpha}$ є повне проходження: $D=1, \quad R=0$. На рис. 4 представлені графіки залежності $D$ та $R$ від параметру $ka$.

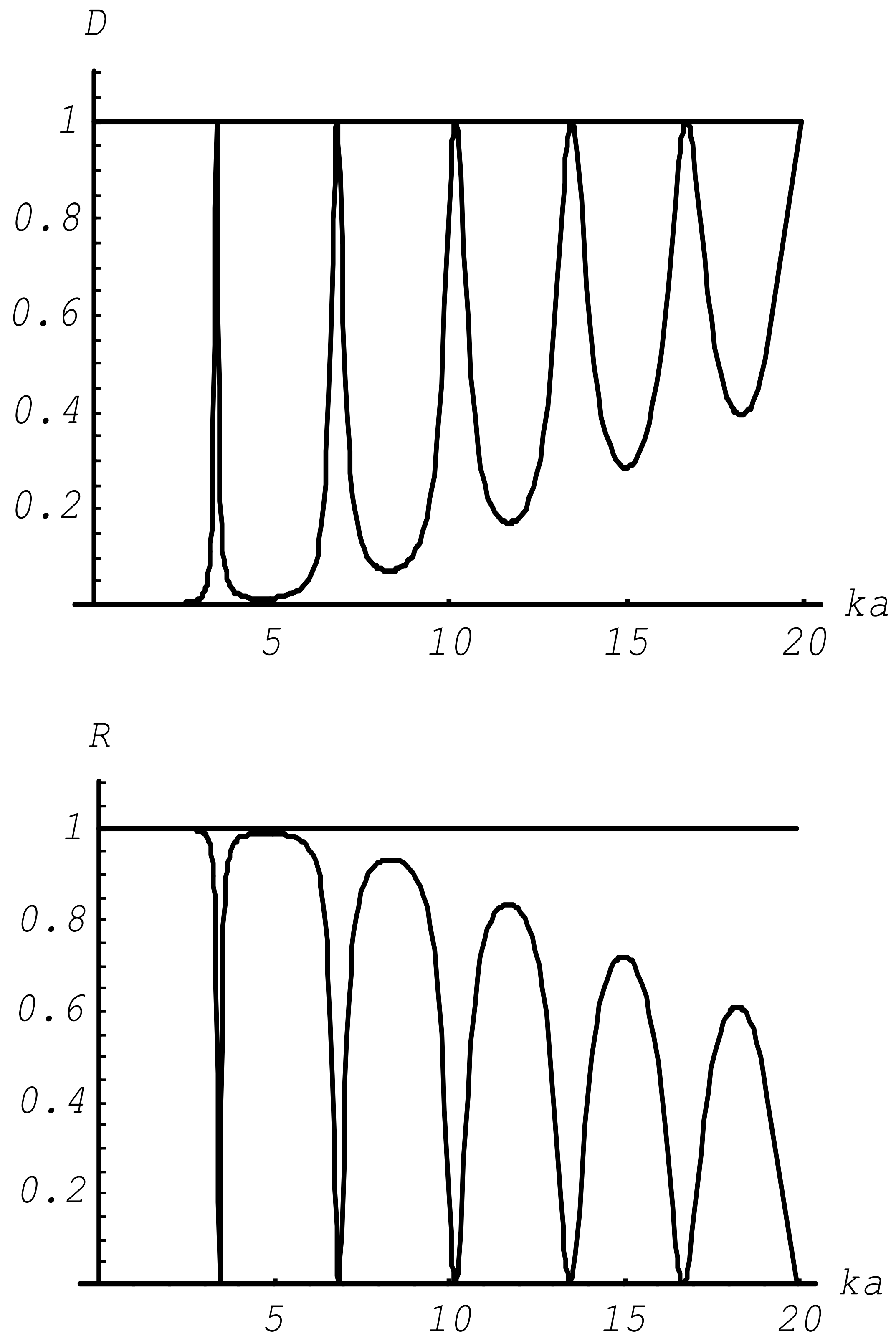


Рис.10. Графіки коефіцієнтів прозорості та відбиття при $a = 5$, $m = 1$, $\alpha = 10$, $\hbar = 1$.