

Примеры выполнения индивидуального расчетного задания Движение частицы в поле двух «дельта-ям»

Рассмотрим в качестве примера решение уравнения Шредингера в координатном представлении для квантовой частицы, движущейся в поле двух дельта-ям

$$U(x) = -\alpha(\delta(x) + \delta(x - a))$$

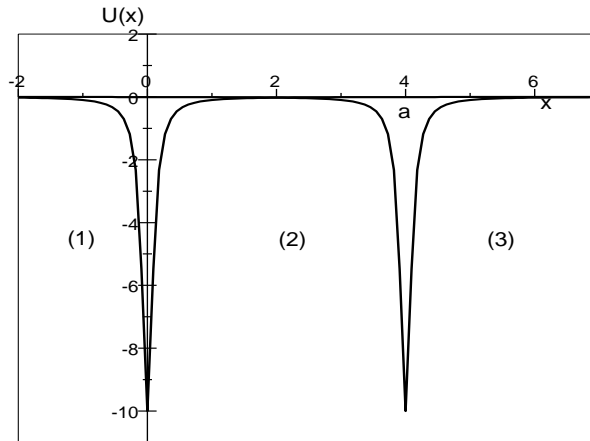


Рис.1. Схематическое изображение потенциальной энергии

$$U(x) = -\alpha(\delta(x) + \delta(x - a))$$

Решение

Рассмотрим одномерное стационарное уравнение Шредингера (УШ)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + U(x)\psi(x) = E\psi \quad (1)$$

В зависимости от знака энергии E движение частицы может быть как финитным при $E < 0$, так и инфинитным при $E > 0$. При $E < 0$ частица находится в связанном состоянии с энергией $\varepsilon = -|E|$.

Во всех заданиях оговаривается, для каких значений энергии следует решать УШ. Мы рассмотрим последовательно два возможных случая.

Рассмотрим сначала отрицательные энергии $E < 0$. УШ в данном случае имеет вид:

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

Мы сразу подставили в уравнение выражение для потенциальной энергии и учли то обстоятельство, что связанные состояния в данном случае должны иметь отрицательные энергии. Волновая функция будет определяться различными аналитическими выражениями в трех областях: 1. $x \leq 0$; 2. $0 \leq x \leq a$; 3. $x \geq a$.

Поскольку дельта-функции $\delta(x)$ и $\delta(x - a)$ отличны от нуля только в точках $x = 0$, $x = a$, то УШ (2) при $x \neq 0$, $x \neq a$ примет вид

$$\psi'' - k_0^2\psi(x) = 0, \quad (3)$$

где $k_0^2 = \frac{2m|E|}{\hbar^2}$.

Определим граничные условия к уравнению (3). Как известно, волновая функция всегда является непрерывной. Из уравнения (2) видно, что в особых точках $x = 0$, $x = a$ вторая производная от волновой функции испытывает бесконечные разрывы. Это означает, что у первой производной в этих точках имеются конечные скачки. Определим их. Дельта-функции $\delta(x)$ и $\delta(x-a)$ дают вклад только в граничные условия, которые определяют скачки первой производной от волновой функции в точках $x = 0$, $x = a$.

Проинтегрируем (2) сначала вблизи точки $x = 0$ от $-\varepsilon$ до $+\varepsilon$

$$\begin{aligned} \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} -\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) dx - \alpha \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \delta(x) \psi(x) dx &= -|E| \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \psi dx \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \psi'(x) \Big|_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} - \alpha \psi(0) &= -|E| \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \psi dx \\ -\frac{\hbar^2}{2m} [\psi'(+\varepsilon) - \psi'(-\varepsilon)] - \alpha \psi(0) &= -|E| [F(+\varepsilon) - F(-\varepsilon)] \end{aligned}$$

Перейдем к пределу $\varepsilon \rightarrow +0$. Тогда в силу непрерывности волновой функции $F(+0) = F(-0) = F(0)$, а скачок первой производной от волновой функции равен

$$\psi'_2(+0) - \psi'_1(-0) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2} \psi(0).$$

Аналогичным образом найдем скачок первой производной в точке $x = a$. Проинтегрируем уравнение (2) вблизи точки $x = a$.

$$\begin{aligned} \int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} -\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) dx - \alpha \int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} \delta(x-a) \psi(x) dx &= -|E| \int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} \psi dx \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \psi'(x) \Big|_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} - \alpha \psi(a) &= -|E| \int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} \psi dx \\ -\frac{\hbar^2}{2m} [\psi'(a+\varepsilon) - \psi'(a-\varepsilon)] - \alpha \psi(a) &= -|E| [F(a+\varepsilon) - F(a-\varepsilon)] \\ F(a+0) = F(a-0) = F(a) \end{aligned}$$

Таким образом, скачок первой производной в точке $x = a$ равняется

$$\psi'_3(a+0) - \psi'_2(a-0) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2} \psi(a).$$

Выпишем все полученные граничные условия

$$\psi_2(+0) = \psi_1(-0);$$

$$\psi'_2(+0) - \psi'_1(-0) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2} \psi(0);$$

$$\psi_3(a+0) = \psi_2(a-0);$$

$$\psi'_3(a+0) - \psi'_2(a-0) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2} \psi(a).$$

(4)

Следует учесть также условие ограниченности волновой функции при $x \rightarrow \pm\infty$. Как уже говорилось, волновая функция определяется тремя разными аналитическими выражениями в трех областях 1. $x \leq 0$; 2. $0 \leq x \leq a$; 3. $x \geq a$

$$\begin{aligned}\psi_1(x) &= A_1 e^{kx} + B_1 e^{-kx}, \quad B_1 = 0 \text{ (из условия ограниченности в.ф.)} \\ \psi_2(x) &= A_2 e^{kx} + B_2 e^{-kx} \\ \psi_3(x) &= A_3 e^{k(x-a)} + B_3 e^{-k(x-a)}, \quad A_3 = 0 \text{ (из условия ограниченности в.ф.)}\end{aligned}$$

Таким образом, четыре коэффициента A_1, A_2, B_2, B_3 волновой функции

$$\begin{aligned}\psi_1 &= A_1 e^{kx}; \\ \psi_2 &= A_2 e^{kx} + B_2 e^{-kx}; \\ \psi_3 &= B_3 e^{-k(x-a)}.\end{aligned} \tag{5}$$

связаны четырьмя граничными условиями (4)

$$\begin{aligned}\text{При } x=0 & \begin{cases} A_2 + B_2 = A_1; \\ A_2 - B_2 = \left(1 - \frac{2m\alpha}{\hbar^2 k}\right) A_1; \end{cases} & \text{Отсюда: } \begin{cases} A_2 = \left(1 - \frac{m\alpha}{\hbar^2 k}\right) A_1; \\ B_2 = \frac{m\alpha}{\hbar^2 k} A_1. \end{cases} \\ \text{При } x=a & \begin{cases} A_2 e^{ka} + B_2 e^{-ka} = B_3; \\ A_2 e^{ka} - B_2 e^{-ka} = \left(-1 + \frac{2m\alpha}{\hbar^2 k}\right) B_3; \end{cases} & \text{Отсюда: } \begin{cases} A_2 = \frac{m\alpha}{\hbar^2 k} e^{-ka} B_3; \\ B_2 = \left(1 - \frac{m\alpha}{\hbar^2 k}\right) e^{ka} B_3. \end{cases}\end{aligned}$$

Таким образом, мы определили связь между коэффициентами A_1, B_3 в областях 1 и 3:

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

Эти коэффициенты определяются системой двух линейных однородных алгебраических уравнений с двумя неизвестными A_1, B_3

$$\begin{cases} \left(1 - \frac{m\alpha}{\hbar^2 k}\right) A_1 - \frac{m\alpha}{\hbar^2 k} e^{-ka} B_3 = 0; \\ \frac{m\alpha}{\hbar^2 k} A_1 - \left(1 - \frac{m\alpha}{\hbar^2 k}\right) e^{ka} B_3 = 0; \end{cases} \tag{6}$$

Такая система имеет нетривиальные решения при условии равенства нулю ее определителя

$$\begin{vmatrix} \left(1 - \frac{m\alpha}{\hbar^2 k}\right) & -\frac{m\alpha}{\hbar^2 k} e^{-ka} \\ \frac{m\alpha}{\hbar^2 k} & -\left(1 - \frac{m\alpha}{\hbar^2 k}\right) e^{ka} \end{vmatrix} = 0. \quad (7)$$

Из уравнения (2.7) находим дисперсионные соотношения для определения уровней энергии

$$\frac{\hbar^2 k}{m\alpha} - 1 = \pm e^{-ka}, \quad (8)$$

а из уравнений (7) и (8) - соотношение между A_1, B_3

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

Введем обозначения: $y = ka$, $y_0 = \frac{m\alpha a}{\hbar^2}$. В новых переменных уравнение (8) примет вид

$$\frac{y}{y_0} - 1 = \pm e^{-y}. \quad (9)$$

Графическое решение уравнений (9) представлено на рис.8.

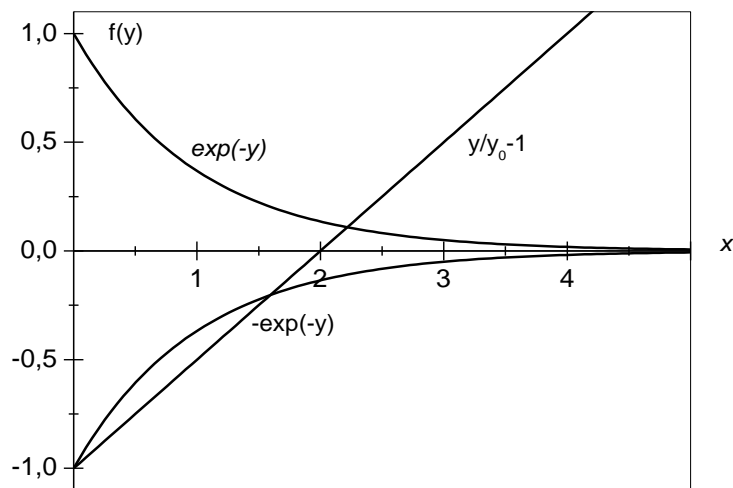


Рис.2. Графическое решение уравнений (1.9) при $a = 5, m = 1, \alpha = 10, \hbar = 1$.

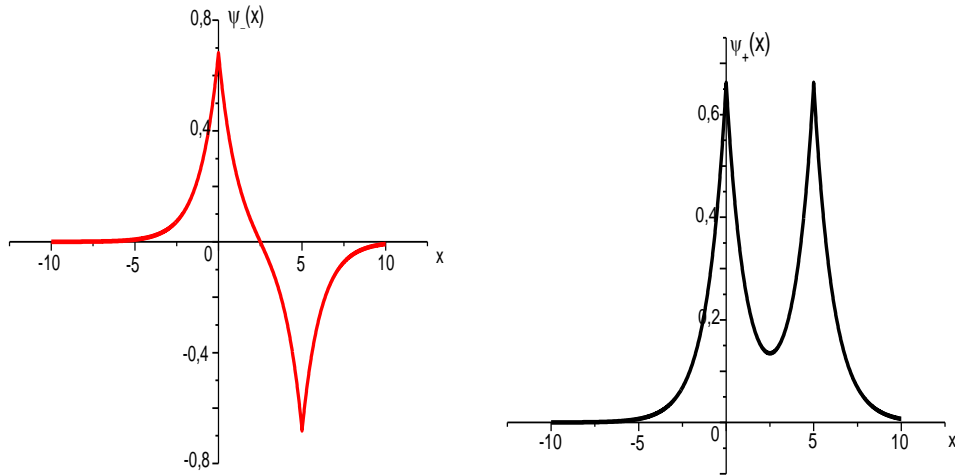
Как видно из рисунка, уравнение $\frac{y}{y_0} - 1 = +e^{-y}$ всегда имеет одно решение, а уравнение

$\frac{y}{y_0} - 1 = -e^{-y}$ имеет решение $y \neq 0$ только при выполнении условия $y_0 > 1$, то есть при

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

Ниже приведены нормированные на единицу волновые функции (2.5) (см. рис.9)

$$\left\{ \begin{array}{l} \psi_1 = \sqrt{\frac{k}{2}} \frac{1}{\sqrt{1 \pm e^{-ka} (1+ka)}} (e^{kx} \pm e^{k(x-a)}), x \leq 0 \\ \psi_2 = \sqrt{\frac{k}{2}} \frac{1}{\sqrt{1 \pm e^{-kx} (1+ka)}} (\pm e^{k(x-a)} + e^{-kx}), 0 \leq x \leq a \\ \psi_3 = \pm \sqrt{\frac{k}{2}} \frac{1}{\sqrt{1 \pm e^{-kx} (1+ka)}} (e^{-k(x-a)} \pm e^{-kx}), x \geq a \end{array} \right. \quad (10)$$



ЫЫ

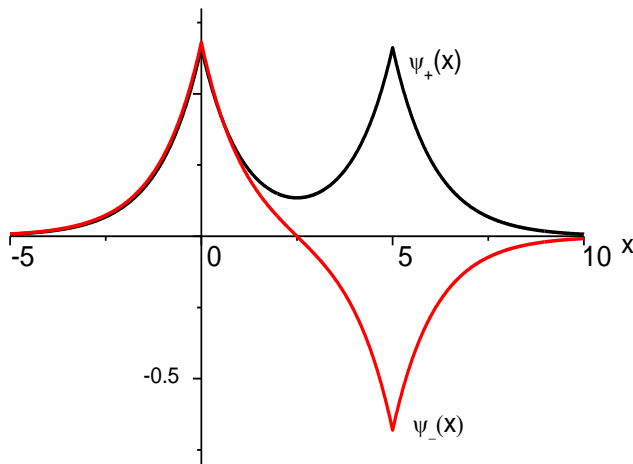


Рис.3. Волновые функции (1.10) при $a = 5, m = 1, \alpha = 10, \hbar = 1$

Рассмотрим теперь случай $E > 0$, который отвечает надбарьерному отражению. Для положительных энергий УШ (1) при $x \neq 0, x \neq a$ имеет вид

$$\psi'' + k^2 \psi(x) = 0, \quad (11)$$

где $\frac{2mE}{\hbar^2} = k^2$

с прежними граничными условиями (4) для волновой функции

$$\begin{cases} \psi_1 = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}; \\ \psi_2 = A_2 e^{ikx} + B_2 e^{-ikx}; \\ \psi_3 = A_3 e^{ik(x-a)}. \end{cases} \quad (12)$$

ы

В формулах (2.12) мы предположили, что нет потока частиц справа, поэтому в третьей области есть только прошедшая волна. Коэффициенты A_3, B_1 выражаются через A_1 следующим образом

$$\begin{aligned} A_3 &= \frac{A_1}{\gamma^2 e^{ika} + (1 - i\gamma)^2 e^{-ika}}; \\ B_1 &= \frac{2i\gamma(\cos ka - \gamma \sin ka) A_1}{\gamma^2 e^{ika} + (1 - i\gamma)^2 e^{-ika}}; \quad \gamma = \frac{m\alpha}{k\hbar^2}. \end{aligned} \quad (13)$$

По известным формулам для коэффициентов прозрачности и отражения

$$\begin{aligned} D &= \frac{|j_{transmitted}|}{|j_{incident}|} = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2}; \\ R &= \frac{|j_{reflected}|}{|j_{incident}|} = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2}. \end{aligned} \quad (14)$$

находим

$$\begin{cases} D = \frac{1}{1 + 4\gamma^2 (\cos ka - \gamma \sin ka)^2}; \\ R = \frac{4\gamma^2 (\cos ka - \gamma \sin ka)^2}{1 + 4\gamma^2 (\cos ka - \gamma \sin ka)^2}. \end{cases} \quad (15)$$

Из формул (2.13), (2.14) видно, что при $\operatorname{tg} ka = \frac{k\hbar^2}{m\alpha}$ имеет место полное прохождение: ы.

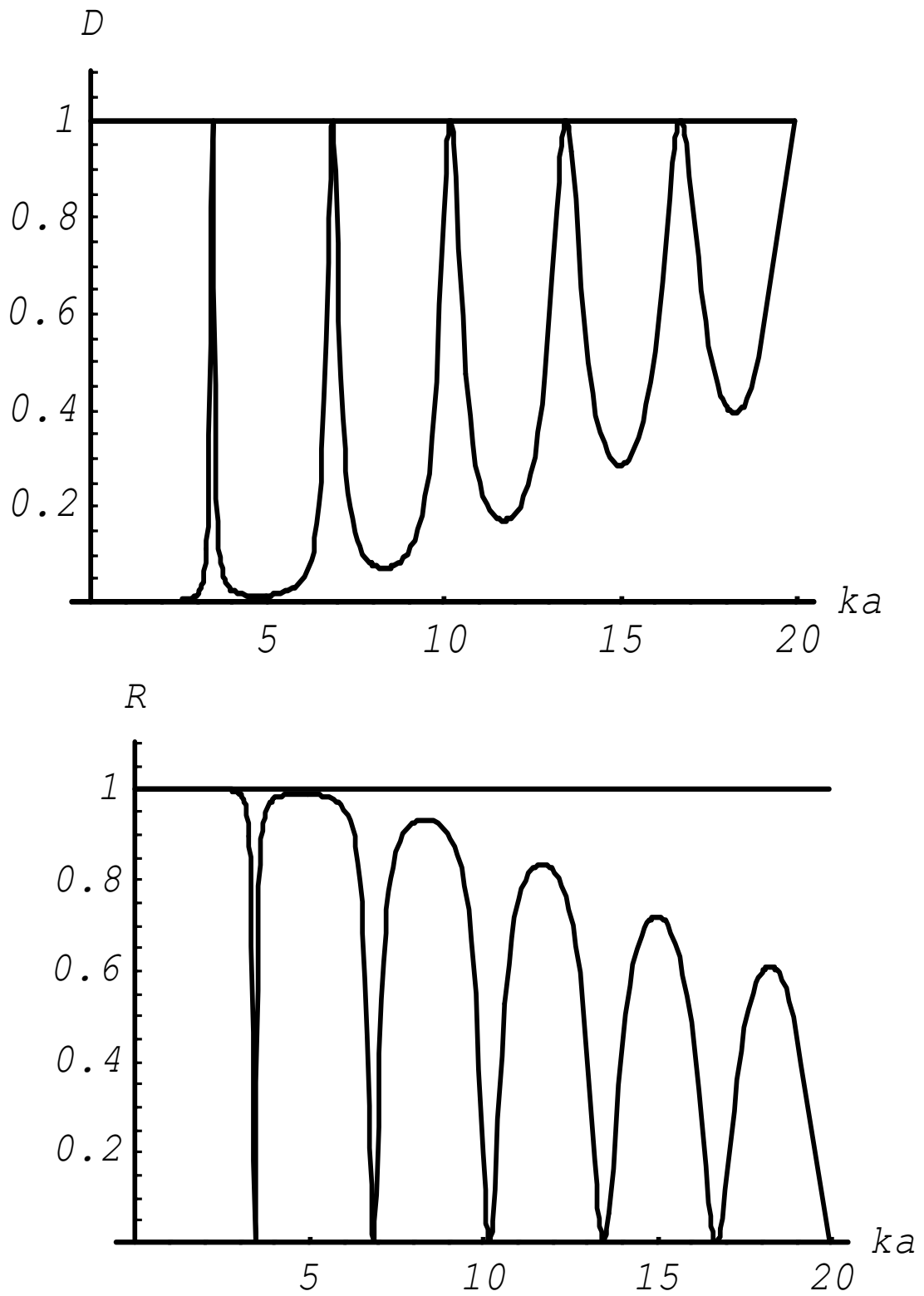


Рис.4. Графики коэффициентов прозрачности и отражения при $a = 5, m = 1, \alpha = 10, \hbar = 1$