

Задача 1

Рассеяние электрона на потенциальной ступеньке

Стационарное уравнение Шредингера
(одномерное движение)

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x)$$

$\hat{H}$ – оператор Гамильтона,

$\psi(x)$ – волновая функция,

E – энергия электрона,

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) \text{ – явный вид гамильтониана,}$$

m_e – масса электрона,

$U(x)$ – потенциальная энергия электрона.

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ |U|, & x > 0 \end{cases}$$

1. Условие $E > |U|$

Расчёт волновых функций

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) \right) \psi(x) = E\psi(x)$$

Область $x < 0$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E\psi(x)$$

Или

$$\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + E\psi(x) = 0$$

$$\psi''(x) + k^2 \psi(x) = 0, \text{ где } k^2 = \frac{2m_e}{\hbar^2} E$$

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}.$$

Если электрон падает на ступеньку слева с вероятностью 1, то $A = 1$

$$\psi(x) = e^{ikx} + Be^{-ikx}$$

Область $x > 0$

Уравнение Шредингера имеет вид

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dx^2} + |U| \right) \psi(x) = E\psi(x)$$

$$\psi''(x) + k'^2 \psi(x) = 0, \text{ где } k'^2 = \frac{2m_e}{\hbar^2} (E - |U|)$$

$$\psi(x) = Ce^{ik'x}$$

Общий вид волновой функции

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + Be^{-ikx}, & x < 0 \\ Ce^{ik'x}, & x > 0 \end{cases}$$

$|B|^2$ – вероятность отражения электрона от барьера,

$|C|^2$ – вероятность проникновения электрона за барьер.

Цель занятия: $B = ?$, $C = ?$.

Расчёт B и C

условие непрерывности функций в точке $x = 0$

$$\psi(x) \big|_{x=-0} = \psi(x) \big|_{x=+0}$$

условие гладкости функций в точке $x = 0$

$$\psi'(x) \big|_{x=-0} = \psi'(x) \big|_{x=+0}$$

$$\psi'(x) = \begin{cases} ike^{ikx} - ikBe^{-ikx}, & x < 0 \\ ik'Ce^{ik'x}, & x > 0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} 1 + B = C \\ ik - ikB = Ck' \end{cases}$$

$$k - kB = (1 + B)k'$$

$$k - k' = B(k + k')$$

$$B = \frac{k - k'}{k + k'},$$

$$C = \frac{2k}{k + k'},$$

$$\text{где } k^2 = \frac{2m_e}{\hbar^2} E, \quad k'^2 = \frac{2m_e}{\hbar^2} (E - |U|).$$

$$B = \frac{\sqrt{E} - \sqrt{E - |U|}}{\sqrt{E} + \sqrt{E - |U|}}$$

$$C = \frac{2\sqrt{E}}{\sqrt{E} + \sqrt{E - |U|}}$$

$$\begin{cases} B = \frac{\sqrt{E} - \sqrt{E - |U|}}{\sqrt{E} + \sqrt{E - |U|}} \\ C = \frac{2\sqrt{E}}{\sqrt{E} + \sqrt{E - |U|}} \end{cases}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} |B|^2 = \left(\frac{\sqrt{E} - \sqrt{E - |U|}}{\sqrt{E} + \sqrt{E - |U|}} \right)^2 - \text{вероятность отражения электрона} \\ |C|^2 = \left(\frac{2\sqrt{E}}{\sqrt{E} + \sqrt{E - |U|}} \right)^2 - \text{вероятность прохождения электрона} \end{array} \right.$$

$|B|^2 = R$ – вероятность отражения электрона от барьера

$$R = \left(\frac{\sqrt{E} - \sqrt{E - |U|}}{\sqrt{E} + \sqrt{E - |U|}} \right)^2 = \left(\frac{1 - \sqrt{1 - \frac{|U|}{E}}}{1 + \sqrt{1 - \frac{|U|}{E}}} \right)^2, \quad E > |U|$$

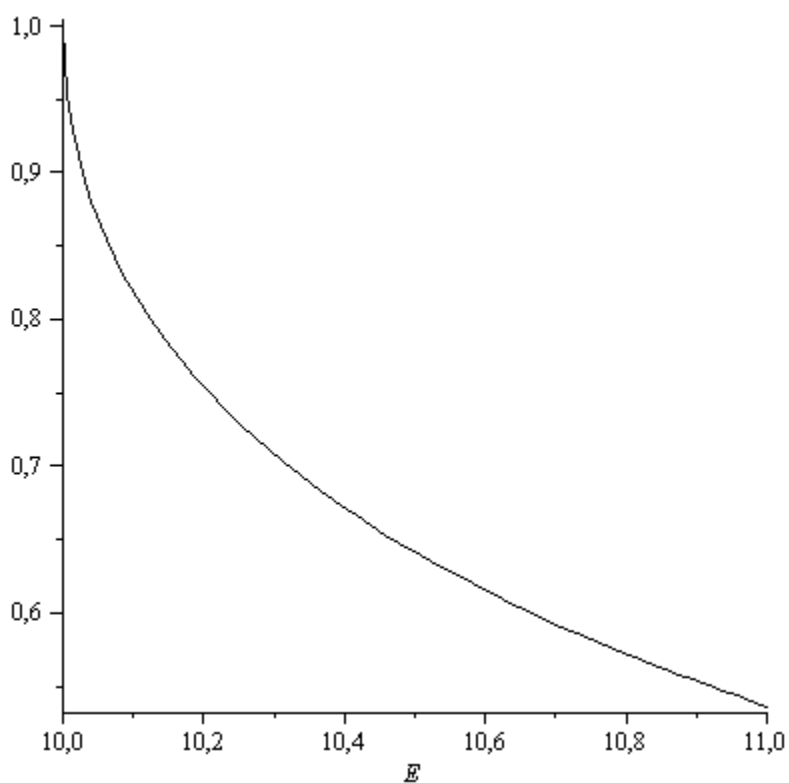


Рис. 1. ($E > |U|$)

Зависимость коэффициента отражения R от энергии электрона E в интервале $U < E < 1.1U$, когда $U = 10 \text{ эВ}$

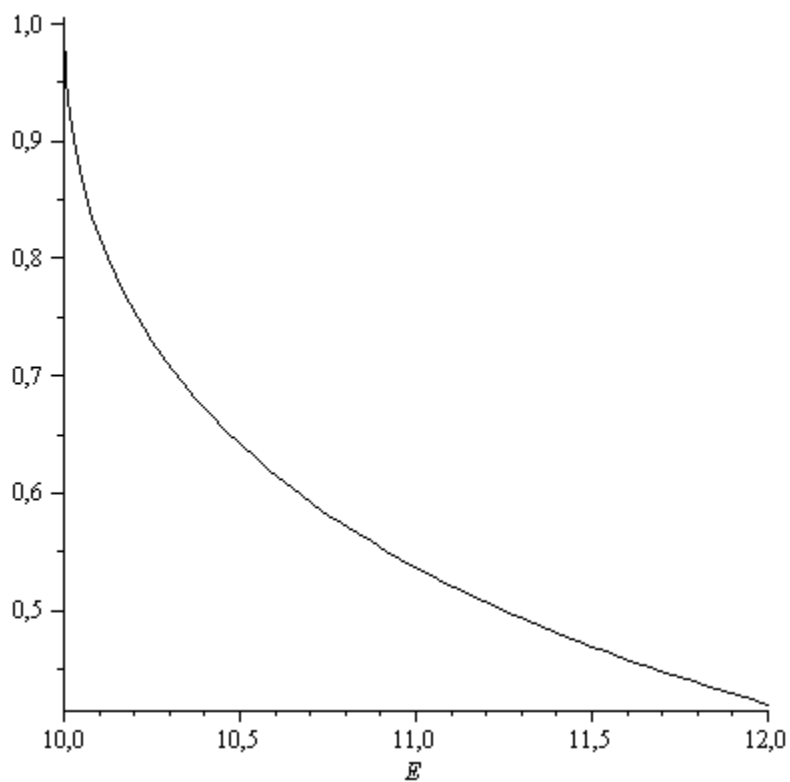


Рис. 2. ($E > |U|$)

Зависимость коэффициента отражения R от энергии электрона E в интервале $U < E < 1.2U$, когда $U=10$ Эв.

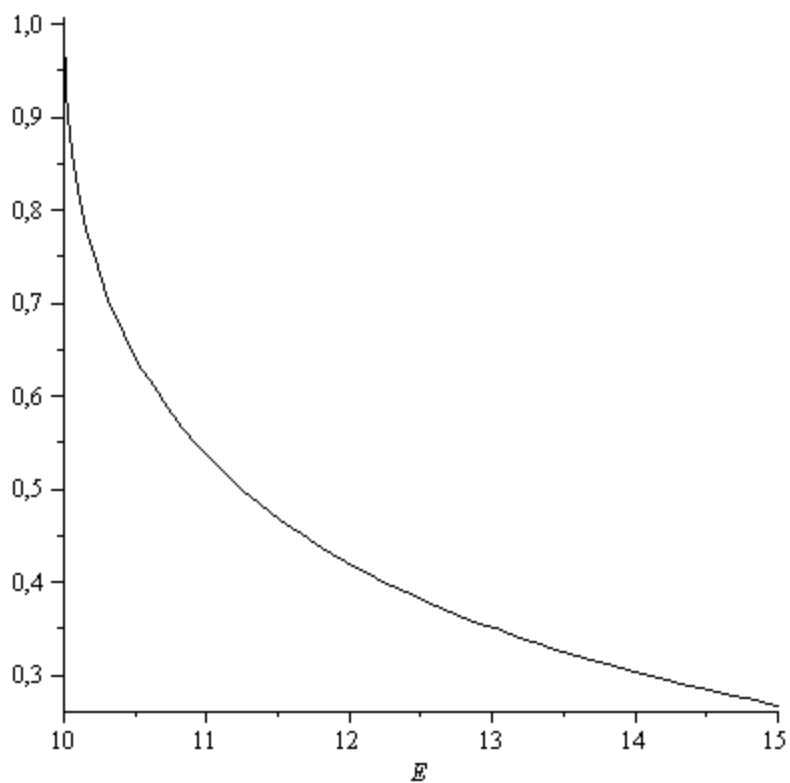


Рис. 3. ($E > |U|$)

Зависимость коэффициента отражения R от энергии электрона E в интервале $U < E < 1.5U$, когда $U=10$ Эв.

2. Условие $0 < E < |U|$

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ |U|, & x > 0 \end{cases}$$

Область $x < 0$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E\psi(x)$$

Или

$$\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + E\psi(x) = 0$$

$$\psi''(x) + k^2 \psi(x) = 0, \text{ где } k^2 = \frac{2m_e}{\hbar^2} E$$

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}.$$

Если электрон падает на ступеньку слева с вероятностью 1, то $A = 1$

$$\psi(x) = e^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad x < 0$$

Область $x > 0$

Уравнение Шредингера имеет вид

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dx^2} + |U| \right) \psi(x) = E\psi(x)$$

$$0 < E < |U|$$

$$\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + (E - |U|) \psi(x) = 0$$

$$\text{то есть } (E - |U|) < 0$$

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} - \frac{2m_e}{\hbar^2} (|U| - E) \psi(x) = 0$$

$$\frac{2m_e}{\hbar^2} (|U| - E) = \alpha^2$$

$$\psi''(x) - \alpha^2 \psi(x) = 0, \quad 0 < E < |U|$$

$$\psi(x) = Fe^{-\alpha x} + Ge^{\alpha x}, \quad x > 0$$

$$\psi(x) = Fe^{-\alpha x}, \quad x > 0$$

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + Be^{-ikx}, & x < 0 \\ Fe^{-\alpha x}, & x > 0 \end{cases}$$

Расчёт B и F

условие непрерывности функций в точке $x = 0$

$$\psi(x) \big|_{x=-0} = \psi(x) \big|_{x=+0}$$

условие гладкости функций в точке $x = 0$

$$\psi'(x) \big|_{x=-0} = \psi'(x) \big|_{x=+0}$$

$$\psi'(x) = \begin{cases} ike^{ikx} - ikBe^{-ikx}, & x < 0 \\ -\alpha Fe^{-\alpha x}, & x > 0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} 1 + B = F \\ ik - ikB = -\alpha F \end{cases}$$

$$ik - ikB = -\alpha(1 + B)$$

$$ik + \alpha = -\alpha B + ikB$$

$$B = \frac{ik + \alpha}{ik - \alpha}$$

$$1 + \frac{ik + \alpha}{ik - \alpha} = F$$

$$F = \frac{2ik}{ik - \alpha}$$

$$0 < E < |U|$$

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + Be^{-ikx}, & x < 0 \\ Fe^{-\alpha x}, & x > 0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} B = \frac{ik + \alpha}{ik - \alpha} \\ F = \frac{2ik}{ik - \alpha} \end{cases}$$

$$\begin{cases} k^2 = \frac{2m_e}{\hbar^2} E \\ \alpha^2 = \frac{2m_e}{\hbar^2} (|U| - E) \end{cases}$$

$|B|^2 = R$ – вероятность отражения электрона от барьера

$$R = \frac{|ik + \alpha|^2}{|ik - \alpha|^2} = \frac{\alpha^2 + k^2}{\alpha^2 + k^2} = 1 - \text{не зависит от энергии электрона } E \text{ и } |U|$$

$$\psi(x) = Fe^{-\alpha x}, \quad x > 0$$

$$\psi(x) = \frac{2ik}{ik - \alpha} e^{-\alpha x}, \quad x > 0$$

$$|\psi(x)|^2 = \left| \frac{2ik}{ik - \alpha} \right|^2 e^{-2\alpha x}, \quad x > 0$$

$$|\psi(x)|^2 = \frac{4E}{|U|} e^{-2\alpha x}, \quad x > 0$$

$$|\psi(x)|^2 = \frac{4E}{|U|} e^{-2x \sqrt{\frac{2m_e}{\hbar^2} (|U| - E)}}, \quad x > 0$$

x_0 – расстояние, где $|\psi(x)|^2$ убывает в e раз

$$2x_0 \sqrt{\frac{2m_e}{\hbar^2} (|U| - E)} = 1$$

$$x_0 = \frac{1}{2\sqrt{\frac{2m_e}{\hbar^2}(|U|-E)}}$$

Заключение

Электрон рассеивается на потенциальной ступеньке

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ |U|, & x > 0 \end{cases},$$

$$1. \ 0 < E < |U|,$$

R – вероятность отражения электрона от барьера,

$R = 1$ – не зависит от энергии электрона E и $|U|$

$$|\psi(x)|^2 = \frac{4E}{|U|} e^{-2x\sqrt{\frac{2m_e}{\hbar^2}(|U|-E)}}, \quad x > 0,$$

$$2. \ R = \left(\frac{\sqrt{E} - \sqrt{E - |U|}}{\sqrt{E} + \sqrt{E - |U|}} \right)^2 = \left(\frac{1 - \sqrt{1 - \frac{|U|}{E}}}{1 + \sqrt{1 - \frac{|U|}{E}}} \right)^2, \quad E > |U|$$

$$3. \ E > |U|$$

$$R = \left(\frac{\sqrt{E} - \sqrt{E - |U|}}{\sqrt{E} + \sqrt{E - |U|}} \right)^2 = \left(\frac{1 - \sqrt{1 - \frac{|U|}{E}}}{1 + \sqrt{1 - \frac{|U|}{E}}} \right)^2, \quad E > |U|$$

Задача 2

Рассеяние электрона на дельта-барьере

Стационарное уравнение Шредингера
(одномерное движение)

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x)$$

$\hat{H}$ – оператор Гамильтона,

$\psi(x)$ – волновая функция,

E – энергия электрона,

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) \text{ – явный вид гамильтониана,}$$

m_e – масса электрона,

$U(x) = |U_0| \delta(x)$ – потенциальная энергия электрона.

Условие $0 \leq E$

Расчёт волновых функций

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dx^2} + |U_0| \delta(x) \right) \psi(x) = E\psi(x)$$

Область $x < 0, \quad x \neq 0$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E\psi(x)$$

Или

$$\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + E\psi(x) = 0$$

$$\psi''(x) + k^2 \psi(x) = 0, \text{ где } k^2 = \frac{2m_e}{\hbar^2} E$$

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}.$$

Если электрон падает на ступеньку слева с вероятностью 1, то $A = 1$

$$\psi(x) = e^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad x < 0$$

Область $x > 0$

Уравнение Шредингера имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E\psi(x)$$

$$\psi''(x) + k^2 \psi(x) = 0, \text{ где } k^2 = \frac{2m_e}{\hbar^2} E$$

$$\psi(x) = Ce^{ikx}, \quad x > 0, \quad x \neq 0$$

Общая структура волновой функции

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + Be^{-ikx}, & x < 0 \\ Ce^{ikx}, & x > 0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} |B|^2 - \text{вероятность отражения электрона} \\ |C|^2 - \text{вероятность прохождения электрона} \end{cases}$$

$$|B|^2 = R - \text{вероятность отражения электрона от барьера}$$

ГЛАВНАЯ ЗАДАЧА

$$B = ?, \quad C = ?$$

Условие непрерывности волновой функции в точке $x = 0$

$$\psi(x) \big|_{x=-0} = \psi(x) \big|_{x=+0}$$

$$1 + B = C$$

Учёт точки $x = 0$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + |U_0| \delta(x) \psi(x) = E \psi(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \int_{x=-0}^{x=+0} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} dx + |U_0| \int_{x=-0}^{x=+0} \delta(x) \psi(x) dx = E \int_{x=-0}^{x=+0} \psi(x) dx$$

$$\int_{x=-0}^{x=+0} \psi(x) dx = 0$$

$$|U_0| \int_{x=-0}^{x=+0} \delta(x) \psi(x) dx = |U_0| \psi(x=0) = |U_0| C$$

$$\int_{x=-0}^{x=+0} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} dx = \frac{d\psi(x)}{dx} \bigg|_{x=-0}^{x=+0}$$

$$\frac{d\psi(x)}{dx} = \begin{cases} ike^{ikx} - ikBe^{-ikx}, & x < 0 \\ ikCe^{ikx}, & x > 0 \end{cases}$$

$$\int_{x=-0}^{x=+0} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} dx = \frac{d\psi(x)}{dx} \bigg|_{x=-0}^{x=+0} = ikC - (ik - ikB)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \int_{x=-0}^{x=+0} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} dx + |U_0| \int_{x=-0}^{x=+0} \delta(x) \psi(x) dx = E \int_{x=-0}^{x=+0} \psi(x) dx$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} (ikC - (ik - ikB)) + |U_0| C = 0$$

Расчёт коэффициентов B, C

$$\begin{cases} 1 + B = C \\ -\frac{\hbar^2}{2m_e} (ikC - (ik - ikB)) + |U_0| C = 0 \end{cases}$$

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + Be^{-ikx}, & x < 0 \\ Ce^{ikx}, & x > 0 \end{cases}$$

Преобразование уравнения

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}(ikC - (ik - ikB)) + |U_0|C = 0$$

$$(ikC - (ik - ikB)) - \frac{2m_e}{\hbar^2}|U_0|C = 0$$

$$ikB + \left(ik - \frac{2m_e}{\hbar^2}|U_0| \right) C = ik$$

$$\begin{cases} 1 + B = C \\ ikB + \left(ik - \frac{2m_e}{\hbar^2}|U_0| \right) C = ik \end{cases}$$

$$ikB + \left(ik - \frac{2m_e}{\hbar^2}|U_0| \right) (1 + B) = ik$$

$$\left(ik \frac{\hbar^2}{m_e} - |U_0| \right) B = |U_0|$$

$$B = \frac{|U_0|}{ik \frac{\hbar^2}{m_e} - |U_0|}$$

$$R = |B|^2 = \frac{|U_0|^2}{\left(k \frac{\hbar^2}{m_e} \right)^2 + |U_0|^2} - \text{вероятность отражения электрона от дельта барьера}$$

$$R = \frac{|U_0|^2}{\frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} \frac{2\hbar^2}{m_e} + |U_0|^2}$$

$$R = \frac{\frac{m_e}{2\hbar^2}|U_0|^2}{\frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} + \frac{m_e}{2\hbar^2}|U_0|^2}$$

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} = E - \text{энергия электрона падающего на барьер,}$$

$$\frac{m_e}{2\hbar^2}|U_0|^2 - \text{величина, имеющая размерность энергии}$$

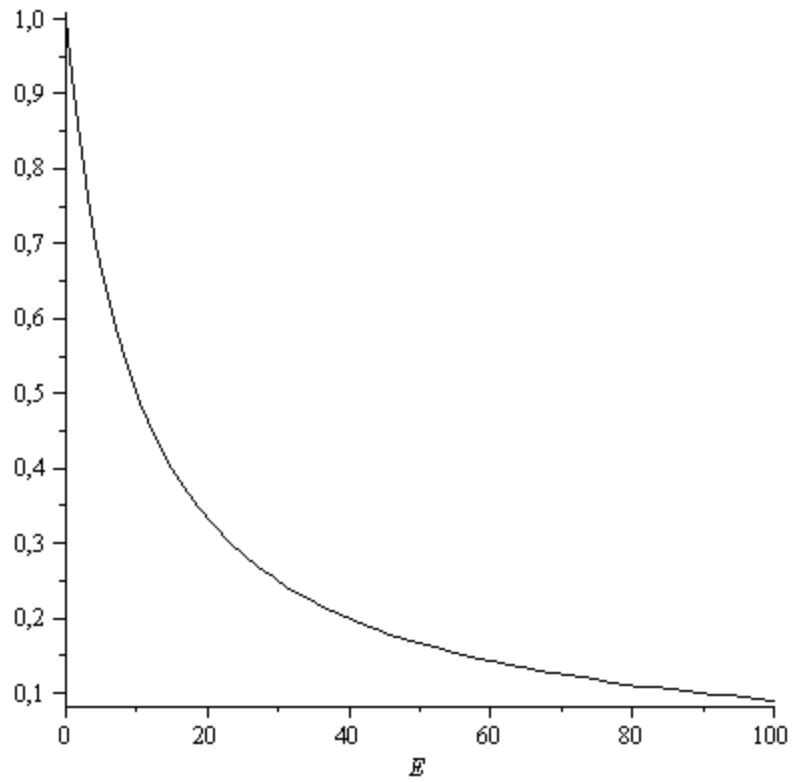


Рис. 1.

Зависимость вероятности отражения R электрона от энергии электрона E в (Эв) в интервале $0 < E < 100$ Эв, когда $\frac{m_e}{2\hbar^2} |U_0|^2 = 10 \text{ эВ}$.

ЗАДАЧА 3

Электрон в одномерной прямоугольной яме с бесконечно высокими стенками. Расчёт нестационарного состояния

$$U(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a \\ \infty, & x < 0, \quad x > a \end{cases}$$

a – ширина ямы

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right), \quad k_n = \frac{n\pi}{a}, \quad E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m_e} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_e a^2} n^2,$$

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

$$\Psi_n(x, t) = \psi_n(x) e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}} \text{ – волновая функция стационарного состояния.}$$

Волновая функция нестационарного состояния

$$\Psi(x, t) = c_n \Psi_n(x, t) + c_m \Psi_m(x, t), \quad n \neq m$$

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}} + \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{m\pi x}{a}\right) e^{-i \frac{E_m t}{\hbar}}$$

Основная задача

$$|\Psi(x, t)|^2 = ?$$

$$|\Psi(x, t)|^2 = \frac{1}{a} \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) + \frac{1}{a} \sin^2\left(\frac{m\pi x}{a}\right) + \frac{1}{a} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{m\pi x}{a}\right) \left(e^{i \frac{(E_m - E_n)}{\hbar} t} + e^{-i \frac{(E_m - E_n)}{\hbar} t} \right)$$

$$\omega_{nm} = \frac{(E_m - E_n)}{\hbar}$$

$$|\Psi(x, t)|^2 = \frac{1}{a} \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) + \frac{1}{a} \sin^2\left(\frac{m\pi x}{a}\right) + 2 \frac{1}{a} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{m\pi x}{a}\right) \cos(\omega_{mn} t)$$

$$\omega_{mn} = \frac{2\pi}{T_{mn}},$$

$$\omega_{mn} t_p = \omega_{mn} \cdot \Delta t \cdot p, \quad \Delta t = \frac{T_{mn}}{M}, \quad p = 0, 1, 2, 3, \dots, M$$

$$\omega_{mn} t_p = \frac{2\pi}{T_{mn}} \cdot \frac{T_{mn}}{M} \cdot p = 2\pi \frac{p}{M}$$

$$a |\Psi(x, t)|^2 = \left(\sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) + \sin^2\left(\frac{m\pi x}{a}\right) + 2 \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{m\pi x}{a}\right) \cos\left(2\pi \frac{p}{M}\right) \right)$$

$$M = 10, \quad p = 0, 1, 2, 3, \dots, 10$$

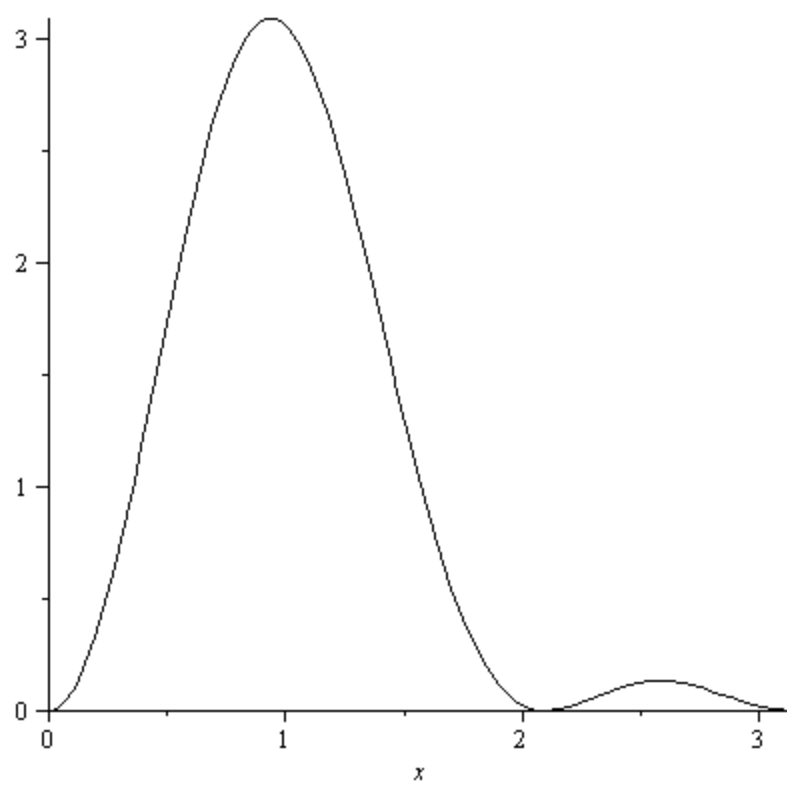


Рис. 1.

Зависимость $a \left| \Psi(x, t_{p=0}) \right|^2$, когда $n=1$, $m=2$.

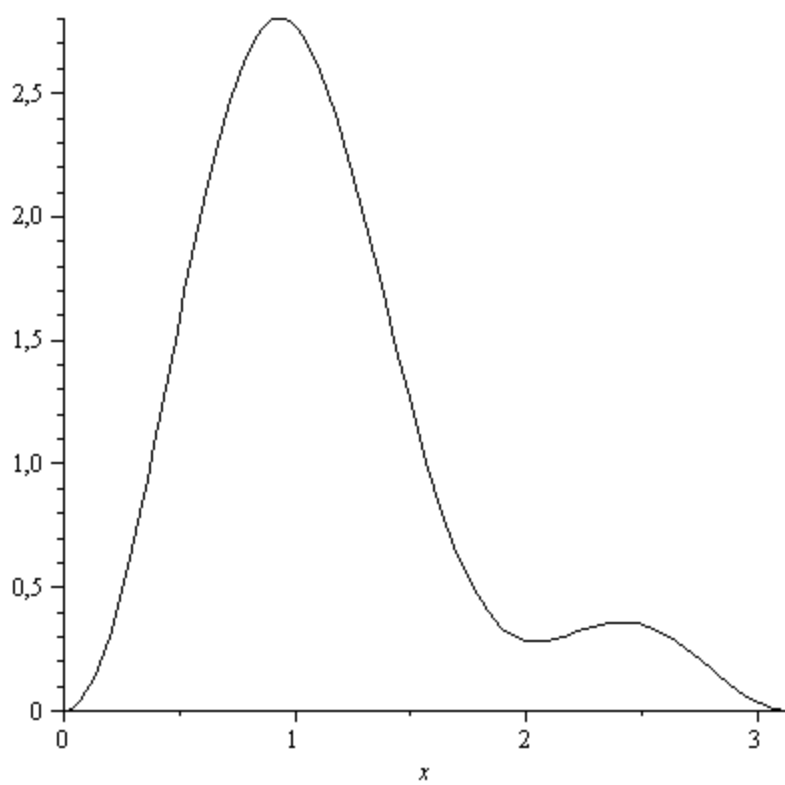


Рис. 2.

Зависимость $a|\psi(x, t_{p=1})|^2$, когда $n=1$, $m=2$.

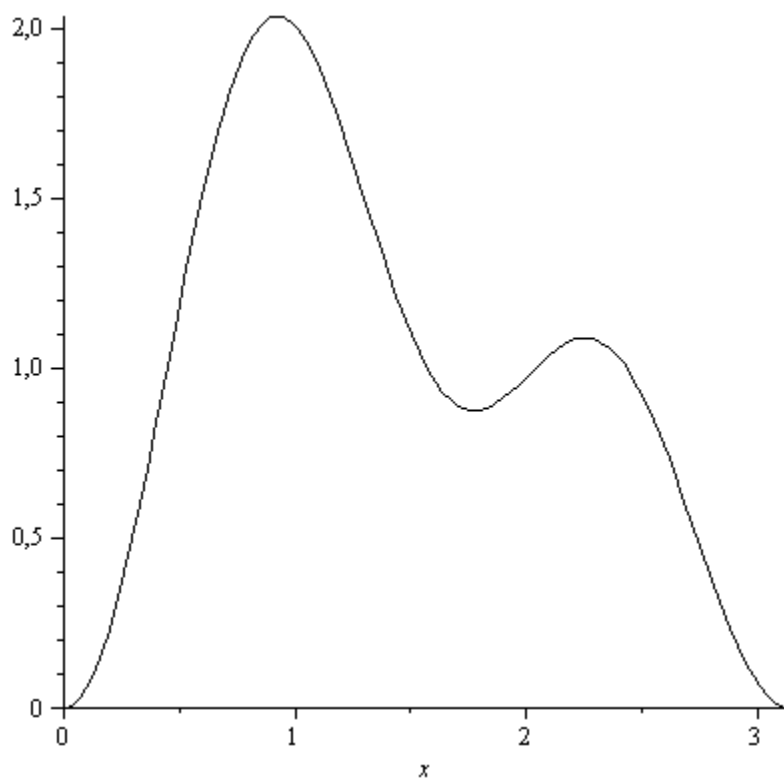


Рис. 3.

Зависимость $a \left| \Psi(x, t_{p=2}) \right|^2$, когда $n=1$, $m=2$.

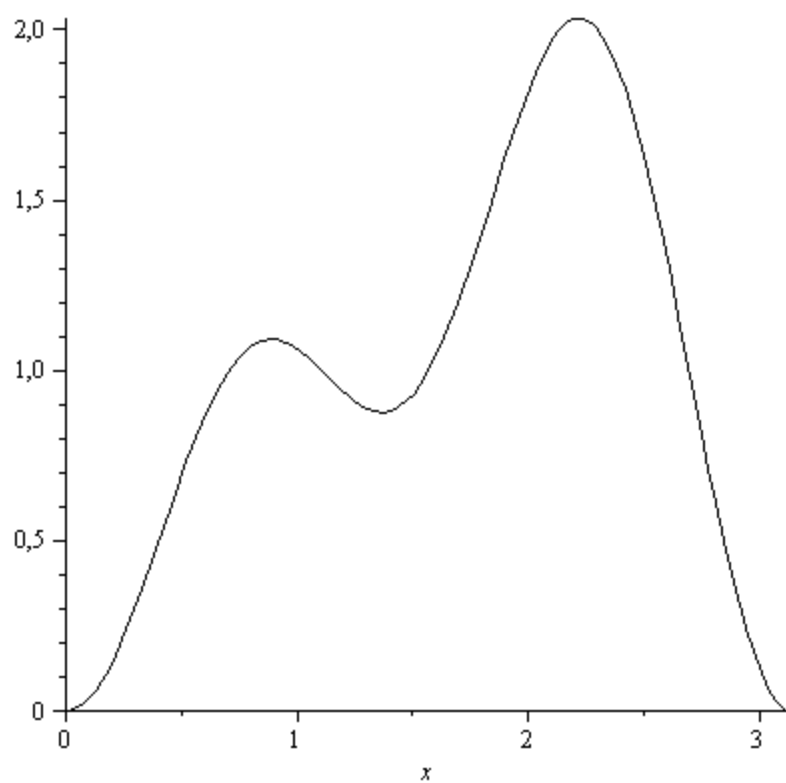


Рис. 4.

Зависимость $a \left| \Psi(x, t_{p=3}) \right|^2$, когда $n=1$, $m=2$.

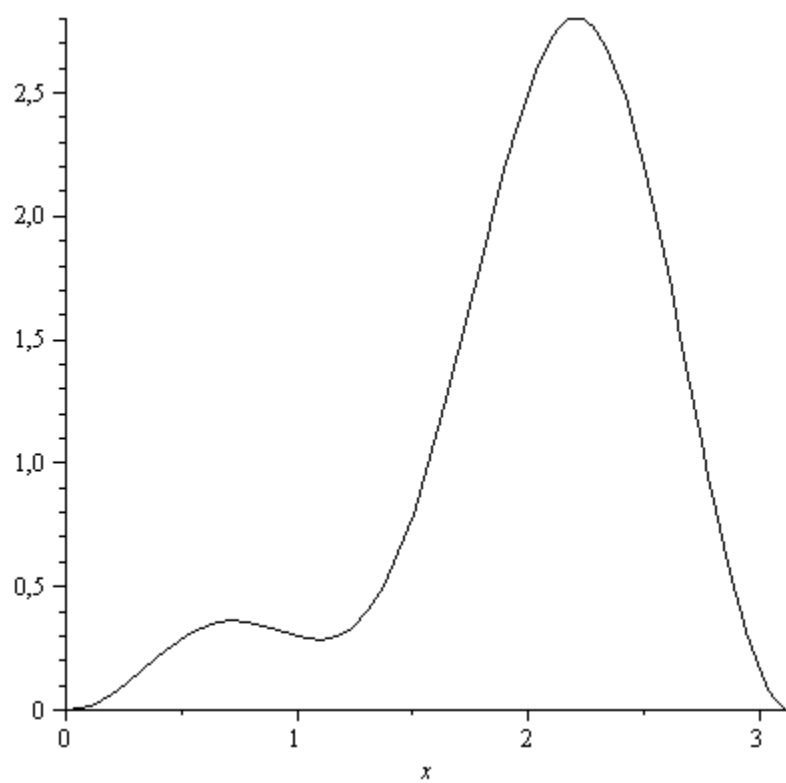


Рис. 5.

Зависимость $a|\psi(x, t_{p=4})|^2$, когда $n=1$, $m=2$.

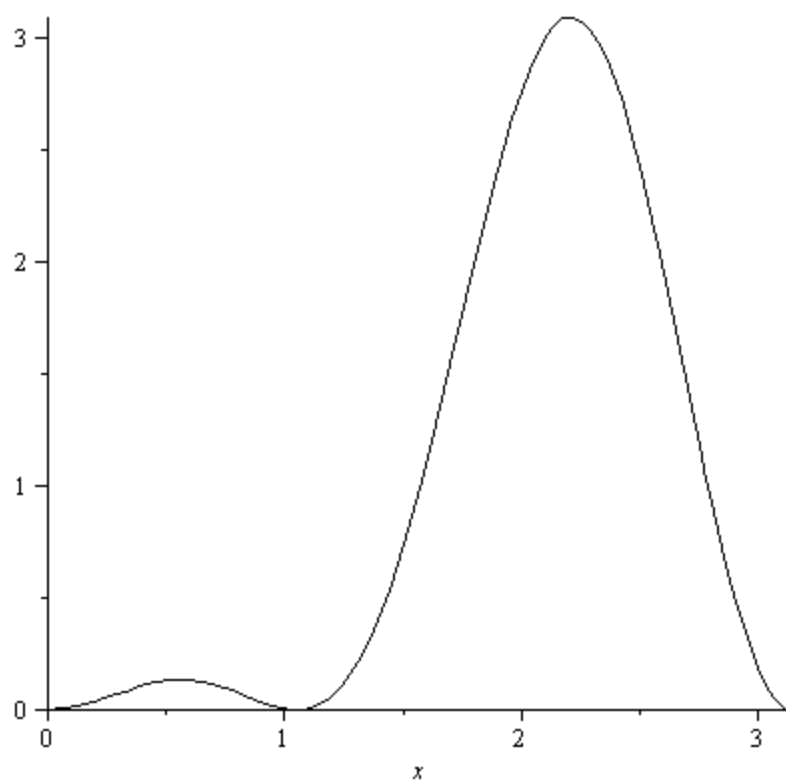


Рис. 6.

Зависимость $a|\Psi(x, t_{p=5})|^2$, когда $n=1$, $m=2$.

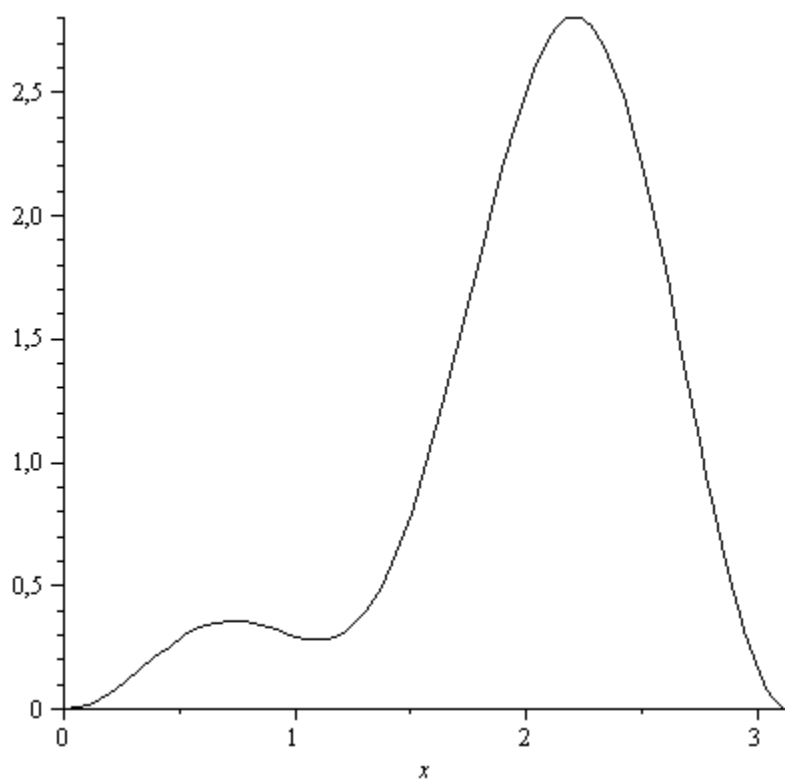


Рис. 7.

Зависимость $a|\Psi(x, t_{p=6})|^2$, когда $n=1$, $m=2$.

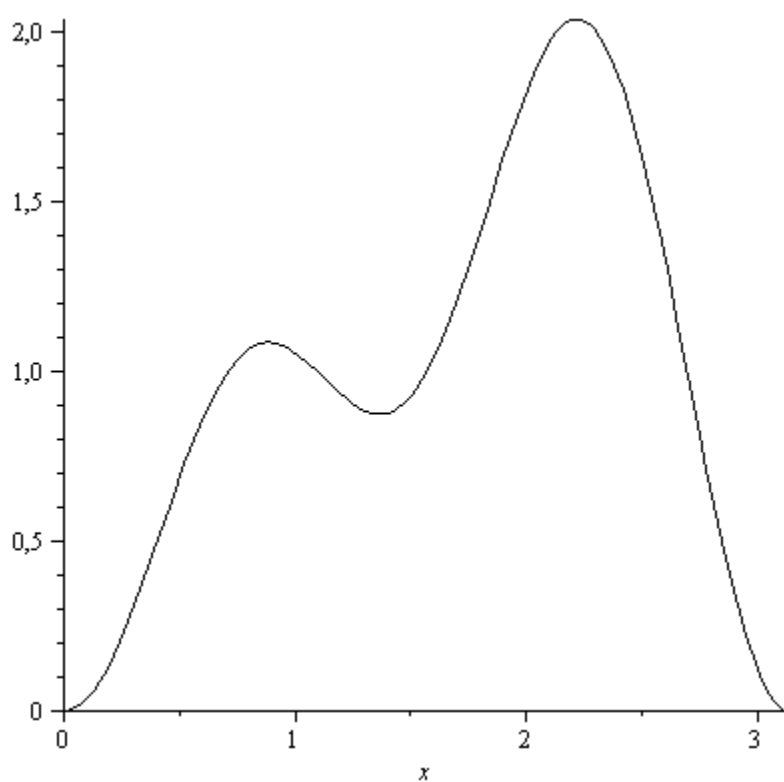


Рис. 8.

Зависимость $a|\Psi(x, t_{p=7})|^2$, когда $n=1$, $m=2$.

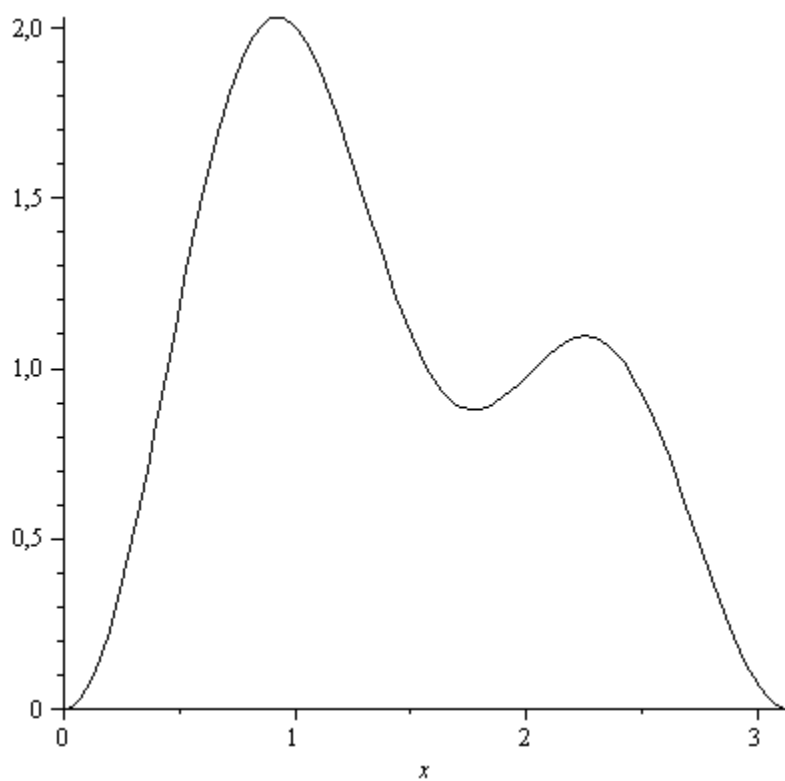


Рис. 9.

Зависимость $a|\Psi(x, t_{p=8})|^2$, когда $n=1$, $m=2$.

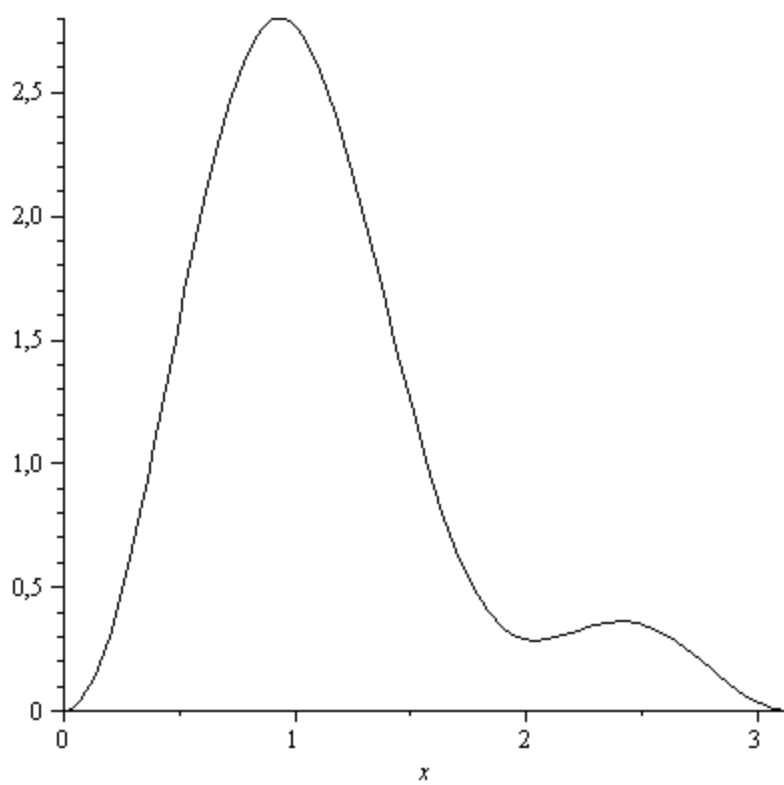


Рис. 10.

Зависимость $a|\Psi(x, t_{p=9})|^2$, когда $n=1$, $m=2$.

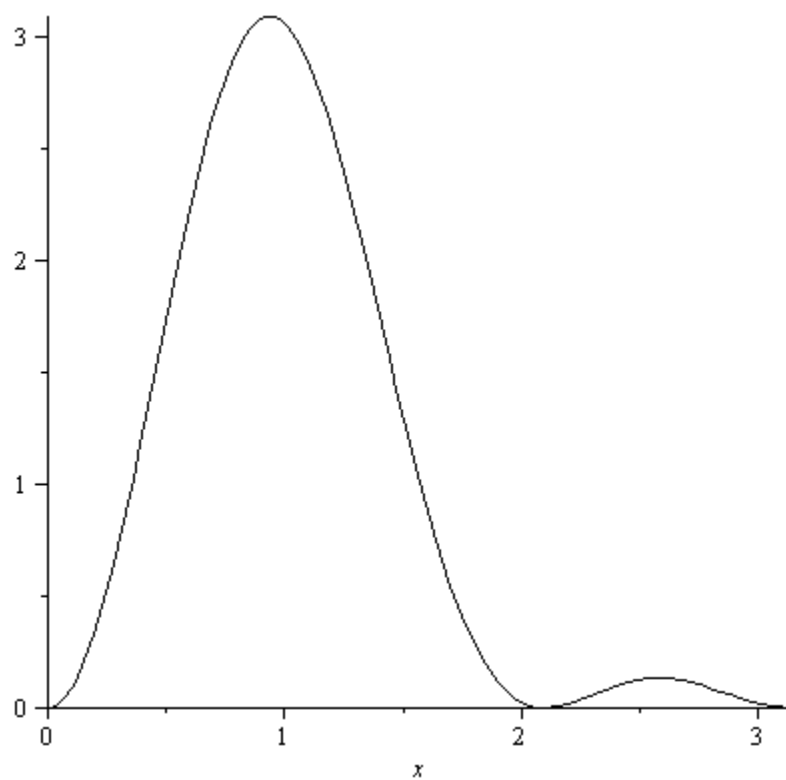


Рис. 11.

Зависимость $a \left| \Psi(x, t_{p=10}) \right|^2$, когда $n=1$, $m=2$.

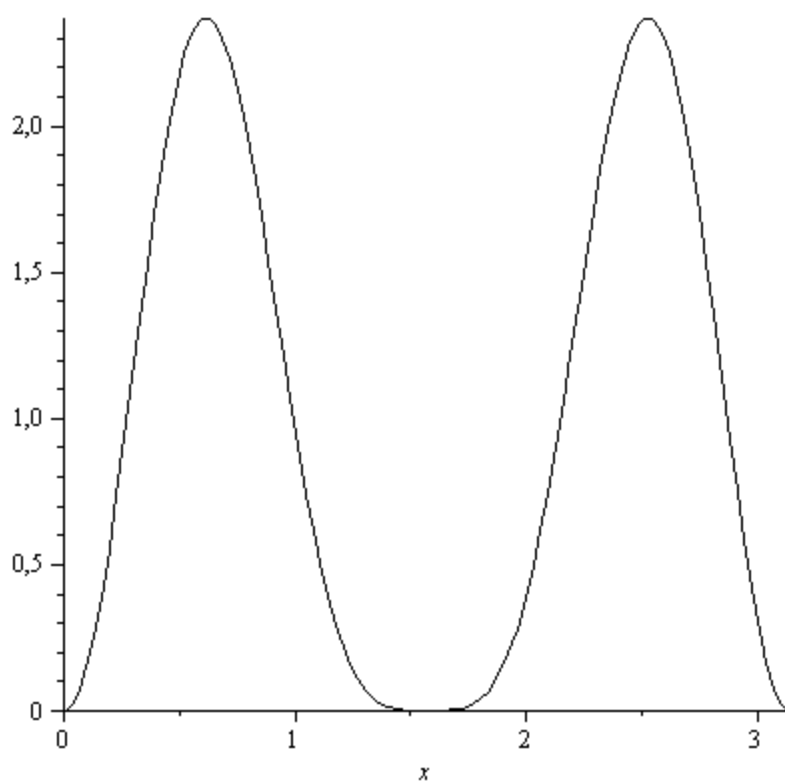


Рис. 12.

Зависимость $a \left| \Psi(x, t_{p=0}) \right|^2$, когда $n=1$, $m=3$.

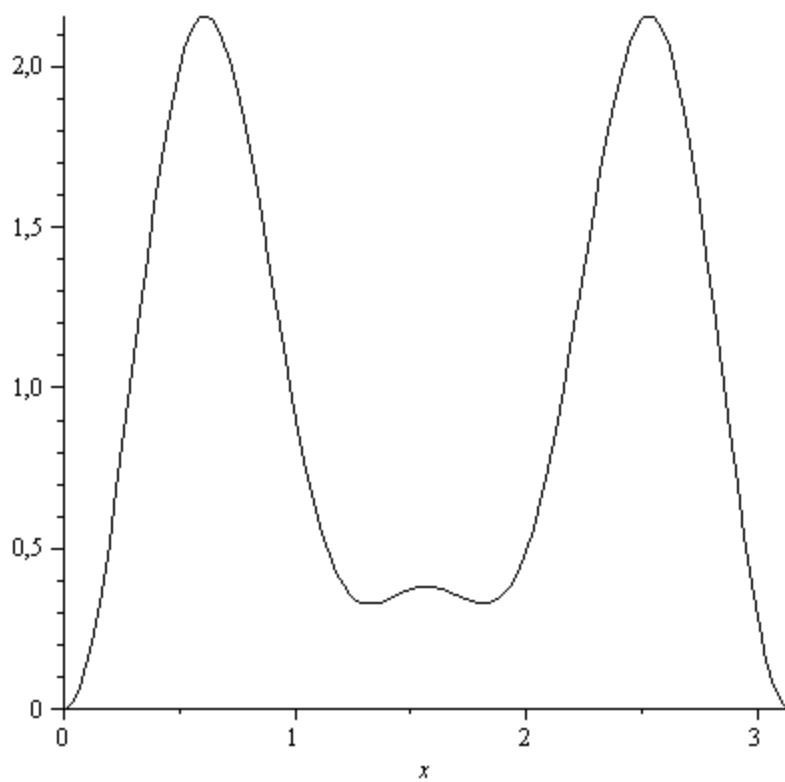


Рис. 13.

Зависимость $a|\psi(x, t_{p=1})|^2$, когда $n=1$, $m=3$.

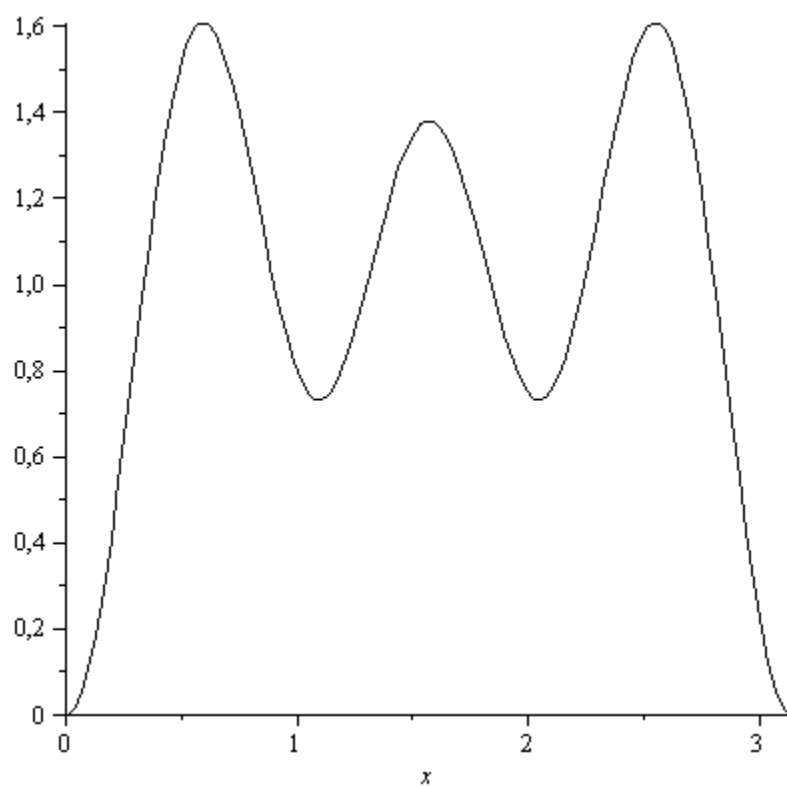


Рис. 14.

Зависимость $a|\psi(x, t_{p=2})|^2$, когда $n=1$, $m=3$.

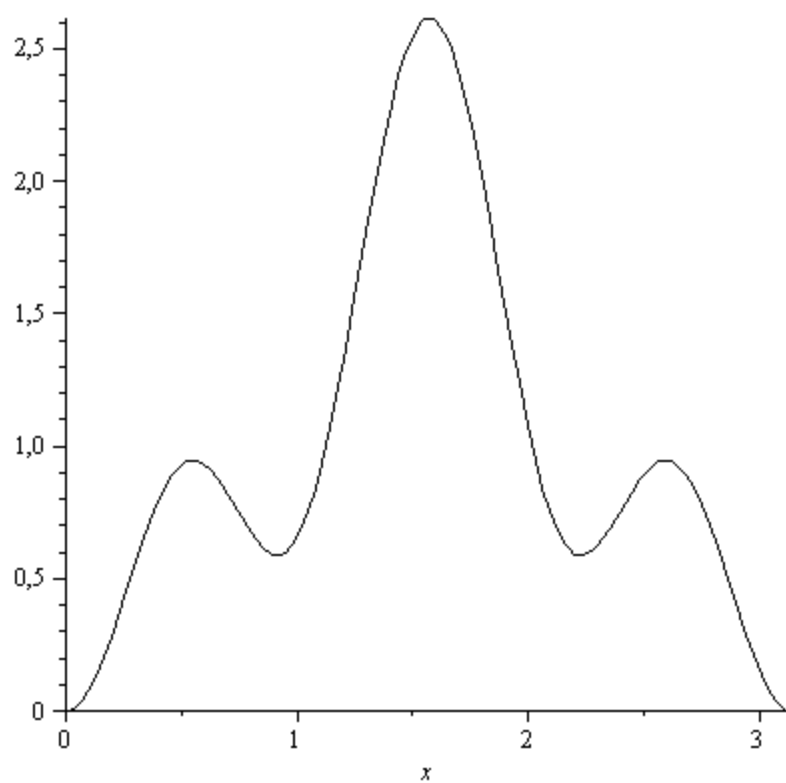


Рис. 15.

Зависимость $a \left| \Psi(x, t_{p=3}) \right|^2$, когда $n=1$, $m=3$.

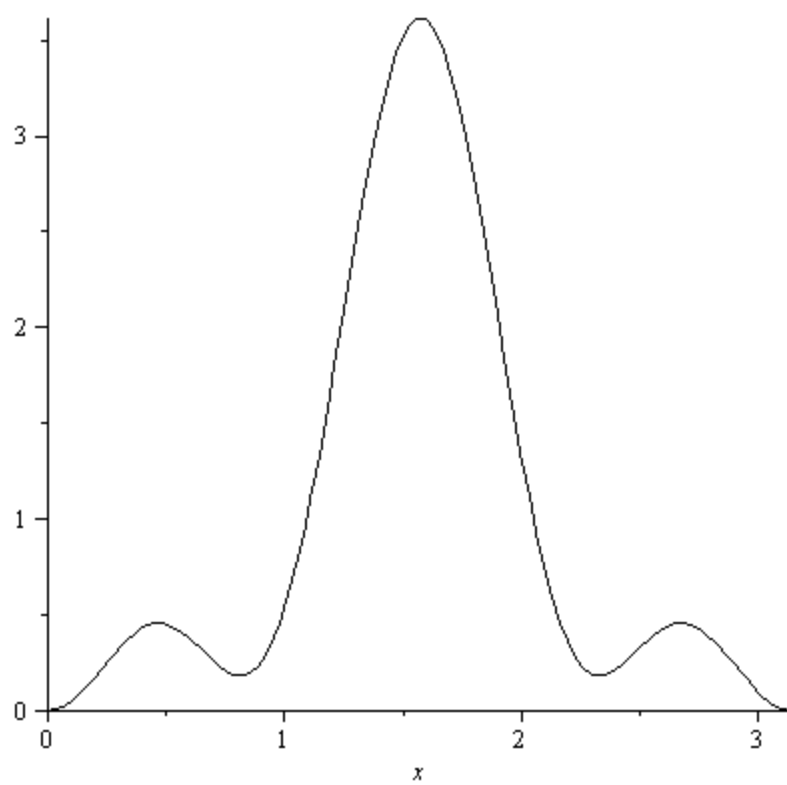


Рис. 16.

Зависимость $a \left| \Psi(x, t_{p=4}) \right|^2$, когда $n=1$, $m=3$.

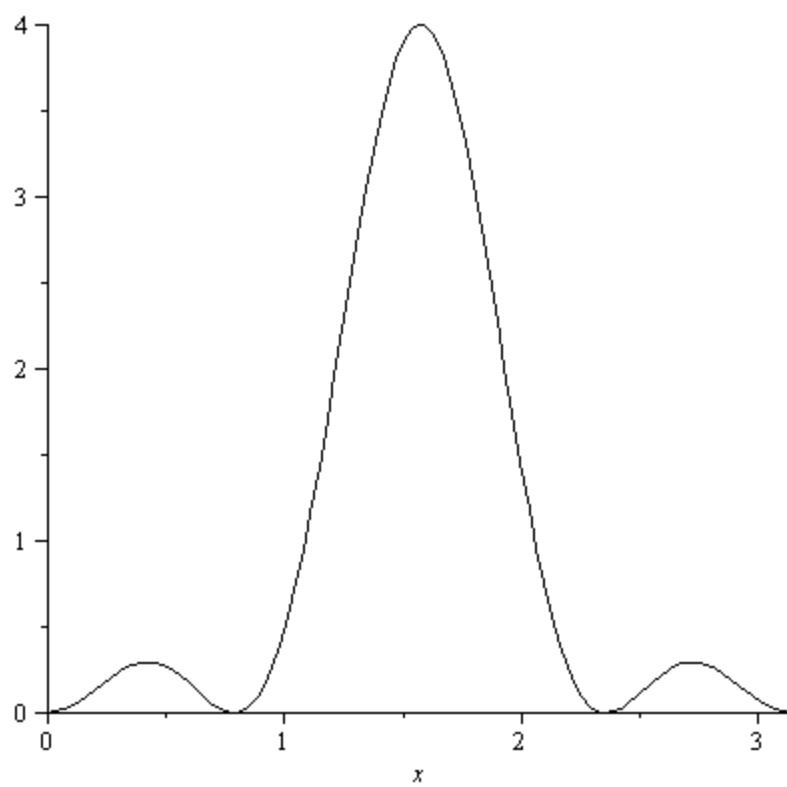


Рис. 17.

Зависимость $a|\psi(x, t_{p=5})|^2$, когда $n=1$, $m=3$.

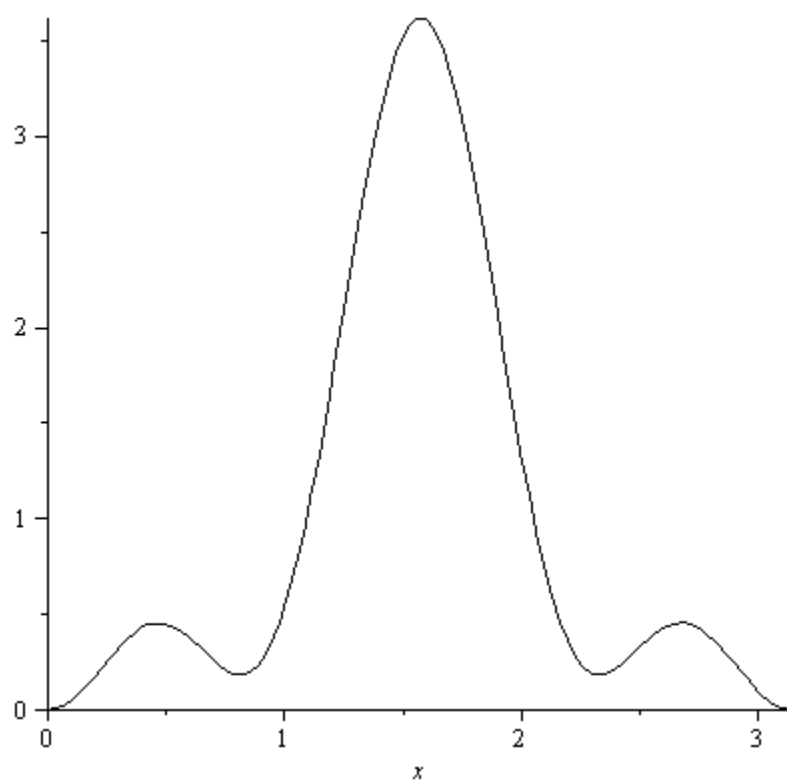


Рис. 18.

Зависимость $a|\psi(x, t_{p=6})|^2$, когда $n=1$, $m=3$.

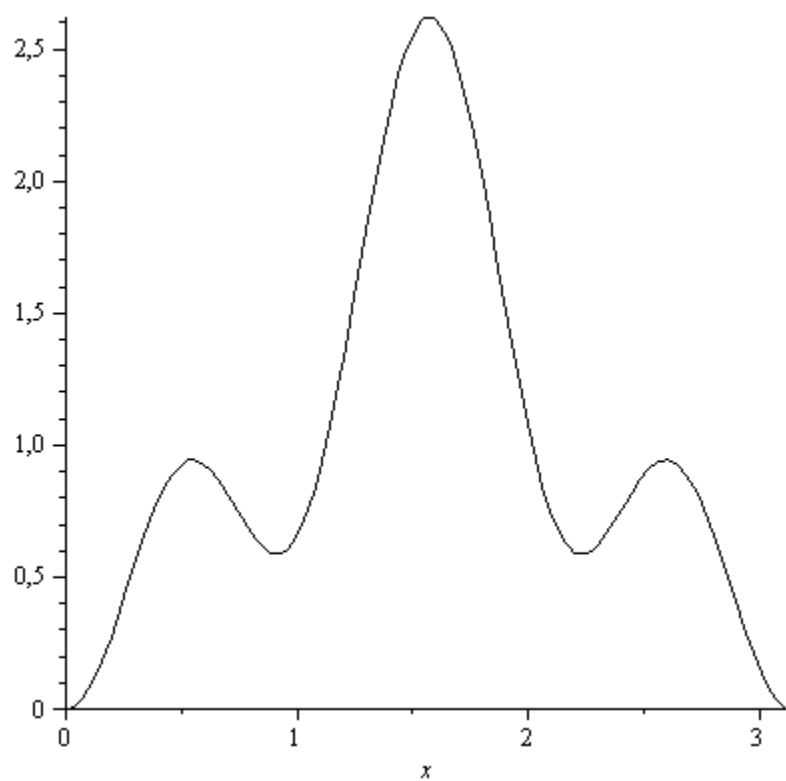


Рис. 19.

Зависимость $a|\Psi(x, t_{p=7})|^2$, когда $n=1$, $m=3$.

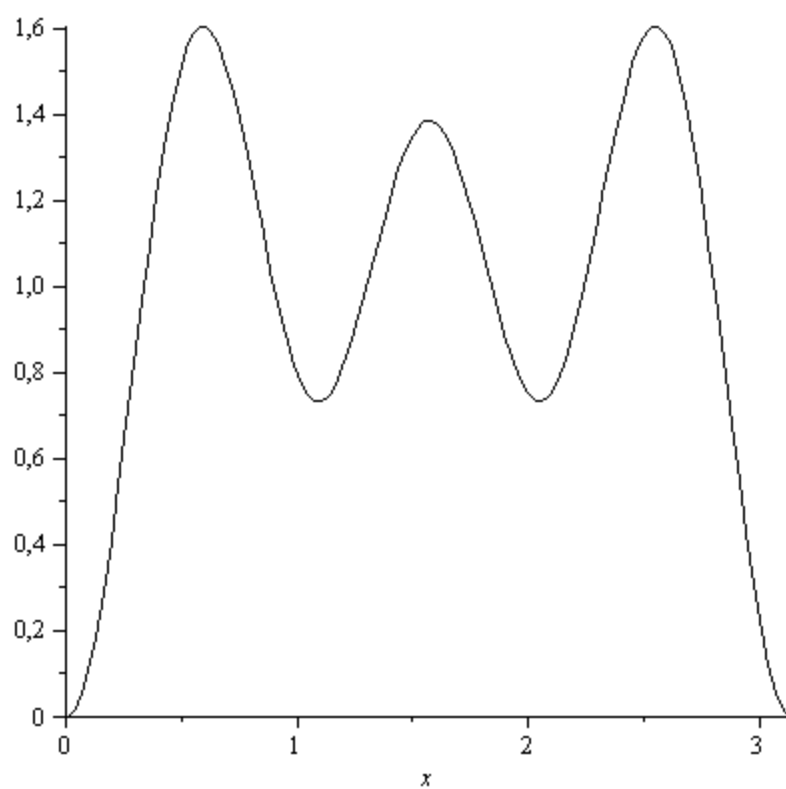


Рис. 20.

Зависимость $a \left| \Psi(x, t_{p=8}) \right|^2$, когда $n=1$, $m=3$.

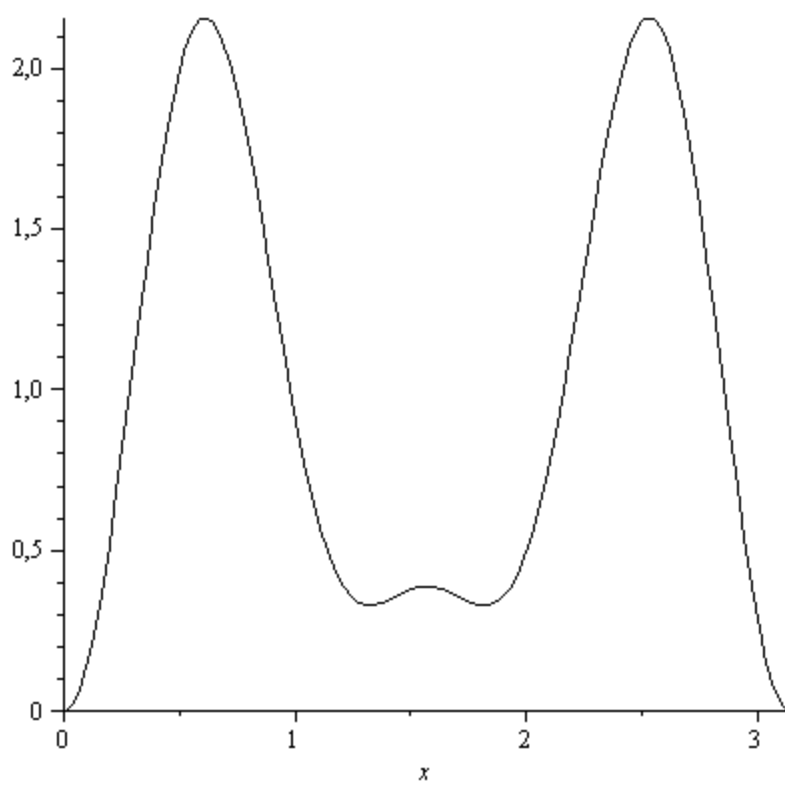


Рис. 21.

Зависимость $a \left| \Psi(x, t_{p=9}) \right|^2$, когда $n=1$, $m=3$.

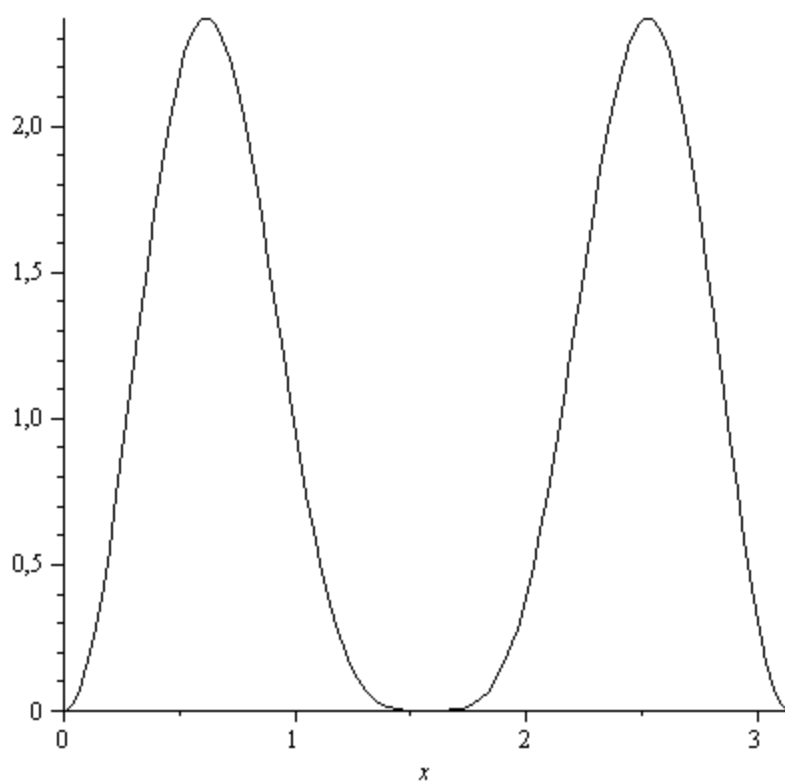


Рис. 22.

Зависимость $a|\psi(x, t_{p=10})|^2$, когда $n=1$, $m=3$