Рассеяние электрона на двух дельта-барьерах

Стационарное уравнение Шредингера
(одномерное движение)

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

$\hat{H}$ – оператор Гамильтона,

$\psi(x)$ – волновая функция,

E – энергия электрона,

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

m_e – масса электрона,

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

Условие $0 \le E$

Задача **Электрон с энергией E падает на систему потенциальных барьеров слева**

Найти: **<u>При каких значениях энергии электрона E электрон не отражается от системы?</u>**

Расчёт волновых функций

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

<u>Область</u> $x < 0$

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

Или

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

$\psi''(x) + k^2\psi(x) = 0$, 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 $x > a$

Уравнение Шредингера имеет вид

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

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

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

Область $0 < x < a$

Уравнение Шредингера имеет вид

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

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

$$\psi(x) = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx}, \quad 0 < x < a$$

Общая структура волновой функции

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

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

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

ГЛАВНАЯ ЗАДАЧА

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

Расчёт коэффициентов

$$B, \ C, \ F, \ G$$

Условие непрерывности волновой функции в точке $x = 0$

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

$$1 + B = F + G$$

Условие непрерывности волновой функции в точке $x = a$

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

$$Fe^{ika} + Ge^{-ika} = Ce^{ika}$$

Последних уравнений

$$\begin{cases} 1+B=F+G \\ Fe^{ika}+Ge^{-ika}=Ce^{ika} \end{cases}$$

Недостаточно, чтобы определить коэффициенты $B,\ C,\ F,\ G$, необходимо ещё два уравнения.

Учёт точки $x=0$

Волновая функция

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

Должна удовлетворять уравнению

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

точке $x=0$. Для этого проинтегрируем последнее уравнение в окрестности точки $x=0$

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

Здесь

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

$$\int\limits_{x=-0}^{x=+0}\delta(x-a)\psi(x)dx=0$$

$$|U_0|\int\limits_{x=-0}^{x=+0}\delta(x)\psi(x)dx=|U_0|\psi(x=0)=|U_0|(1+B)$$

Интеграл $\int\limits_{x=-0}^{x=+0}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}dx$ можно взять по формуле Ньютона-Лейбница

$$\int\limits_{x=-0}^{x=+0}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}dx=\frac{d\psi(x)}{dx}\Big|_{x=-0}^{x=+0}.$$

Это позволяет представить проинтегрированное уравнение в окрестности точки $x=0$ как

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

Для вычисления последнего условия нужно найти $\frac{d\psi(x)}{dx}$

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

Подстановка $\frac{d\psi(x)}{dx}$ точке $x=0$ в формулу Ньютона-Лейбница позволяет получить ещё одно алгебраическое уравнение для определения коэффициентов B, C, F, G

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\Big((ikF-ikG)-(ik-ikB)\Big)+|U_0|(1+B)=0.$$

$$B+F-G-1-\frac{2m_e}{ik\hbar^2}|U_0|(1+B)=0$$

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

$$\begin{cases} 1+B=F+G \\ Fe^{ika}+Ge^{-ika}=Ce^{ika} \\ \left(1-\frac{2m_e}{ik\hbar^2}|U_0|\right)B+F-G=1+\frac{2m_e}{ik\hbar^2}|U_0| \end{cases}$$

Учёт точки $x=a$

Волновая функция

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

Должна удовлетворять уравнению

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

точке $x=a$. Для этого проинтегрируем последнее уравнение в окрестности точки $x=a$

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

В последней конструкции интегралы

$$\int\limits_{x=a-0}^{x=a+0}\psi(x)dx \text{ и } \int\limits_{x=a-0}^{x=a+0}\delta(x)\psi(x)dx$$

равны нулю,

а интеграл

$$\int\limits_{x=a-0}^{x=a+0}\delta(x-a)\psi(x)dx,$$

принимает значение $\psi(x=a)=Fe^{ika}+Ge^{-ika}$,

интеграл же

$$\int\limits_{x=a-0}^{x=a+0}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}dx$$

можно взять по формуле Ньютона-Лейбница

$$\int\limits_{x=a-0}^{x=a+0} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2}dx = \frac{d\psi(x)}{dx}\Big|_{x=a-0}^{x=a+0}.$$

Для расчёта последней величины необходимо найти $\frac{d\psi(x)}{dx}$

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

Явный вид производной волновой функции позволяет найти величину

$$\frac{d\psi(x)}{dx}\Big|_{x=a-0}^{x=a+0} = ikCe^{ika} - \left(ikFe^{ika} - ikGe^{-ika}\right).$$

Теперь выражение

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

принимает вид

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

или

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\left(ikCe^{ika} - \left(ikFe^{ika} - ikGe^{-ika}\right)\right) + |U_0|\left(Fe^{ika} + Ge^{-ika}\right) = 0.$$

Это алгебраическое уравнение можно записать в виде

$$-F\left(1 + \frac{2m_e|U_0|}{ik\hbar^2}\right)e^{ika} + G\left(1 - \frac{2m_e|U_0|}{ik\hbar^2}\right)e^{-ika} + Ce^{ika} = 0$$

$$\begin{cases} 1 + B = F + G \\ Fe^{ika} + Ge^{-ika} = Ce^{ika} \\ \left(1 - \frac{2m_e}{ik\hbar^2}|U_0|\right)B + F - G = 1 + \frac{2m_e}{ik\hbar^2}|U_0| \\ -F\left(1 + \frac{2m_e|U_0|}{ik\hbar^2}\right)e^{ika} + G\left(1 - \frac{2m_e|U_0|}{ik\hbar^2}\right)e^{-ika} + Ce^{ika} = 0 \end{cases}$$

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

$$\xi = \frac{m_e a}{\hbar^2}|U_0|, \quad x = ka$$

$$B = \frac{\left(1+\frac{\xi}{ix}\right)\frac{\xi}{ix}e^{ix} + \frac{\xi}{ix}\left(1-\frac{\xi}{ix}\right)e^{-ix}}{\left(1-\frac{\xi}{ix}\right)^2 e^{-ix} - \frac{\xi}{ix}e^{ix}}$$

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

Отсутствие отражения $B = 0$

$$\left(1+\frac{\xi}{ix}\right)e^{ix} + \left(1-\frac{\xi}{ix}\right)e^{-ix} = 0$$

$$tg(x) = -\frac{x}{\frac{m_e a}{\hbar^2}|U_0|} \Rightarrow x_1, x_2, x_3, ...$$

Корни $x = ka$

$x_1, x_2, x_3, .. \Rightarrow k_1, k_2, k_3 ..$

$$k^2 = \frac{2m_e}{\hbar^2}E \Rightarrow k_i^2 = \frac{2m_e}{\hbar^2}E_i$$

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

$$B=\frac{\left(1+\frac{\xi}{ix}\right)\frac{\xi}{ix}e^{ix}+\frac{\xi}{ix}\left(1-\frac{\xi}{ix}\right)e^{-ix}}{\left(1-\frac{\xi}{ix}\right)^{2}e^{-ix}-\frac{\xi}{ix}e^{ix}},\quad \xi=\frac{m_e a}{\hbar^2}\left|U_0\right|,\quad x=ka$$

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

$U(x)=\left|U_0\right|\delta(x)+\left|U_0\right|\delta(x-a)-$ потенциальная энергия электрона.

$B=0-$ **условие отсутствия отражения**

$$\left(1+\frac{\xi}{ix}\right)e^{ix}+\left(1-\frac{\xi}{ix}\right)e^{-ix}=0$$

$$\left(1+\frac{\xi}{ix}\right)e^{ix}+\left(1-\frac{\xi}{ix}\right)e^{-ix}=0\Rightarrow e^{ix}+e^{-ix}+\frac{\xi}{ix}\left(e^{ix}-e^{ix}\right)=0$$

$$cos(x)+\frac{\xi}{x}\sin(x)=0\Rightarrow\frac{\sin(x)}{\cos(x)}=-\frac{1}{\frac{\xi}{x}}\Rightarrow tg(x)=-\frac{x}{\frac{m_e a}{\hbar^2}\left|U_0\right|}$$

Условие, когда электрон не отражается от двух потенциальных барьеров

$$tg(x)=-\frac{x}{\frac{m_e a}{\hbar^2}\left|U_0\right|}\Rightarrow x_1,x_2,x_3,..$$

Корни $x=ka$

$$x_1,x_2,x_3,..\Rightarrow k_1,k_2,k_3..$$

$$k^2=\frac{2m_e}{\hbar^2}E\Rightarrow k_i^2=\frac{2m_e}{\hbar^2}E_i$$

Рассеяние электрона на прямоугольном потенциальном барьере

Стационарное уравнение Шредингера
(одномерное движение)

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

$\hat{H}$ – оператор Гамильтона,

$\psi(x)$ – волновая функция,

E – энергия электрона,

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

m_e – масса электрона,

$U(x)$ – потенциальная энергия электрона.

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \quad x > a \\ |U_0|, & 0 < x < a \end{cases}$$

Условие $E > |U_0|$

Расчёт волновых функций

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

<u>Область</u> $x < 0$

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

Или

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

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

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

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

<u>Область</u> $a < x$

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

Или

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

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

$$\psi(x) = Ge^{ik(x-a)}, \quad x > a$$

<u>Область</u> $0 < x < a$

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

$$\psi''(x)+k'^2\psi(x)=0\,,\ \text{где}\ k'^2=\frac{2m_e}{\hbar^2}\left(E-|U_0|\right)$$

$$\psi(x)=Be^{ik'x}+Ce^{-ik'x},\ 0<x<a$$

Общая структура волновой функции

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

Расчёт $A,\ B,\ C,\ G$

условие непрерывности функций в точке $x=0$

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

условие гладкости функций в точке $x=0$

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

условие непрерывности функций в точке $x=a$

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

условие гладкости функций в точке $x=a$

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

Для реализации этих условий необходима величина

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

Условия непрерывности и гладкости волновых функций в точках $x=0$ и $x=a$ приводит к следующей системе линейных алгебраических уравнений

$$\begin{cases} 1+A=B+C \\ ike-ikA=ik'B-ik'C \\ Be^{ik'a}+Ce^{-ik'a}=G \\ ik'Be^{ik'a}-ik'Ce^{-ik'a}=ik'G \end{cases}$$

G – *коэффициент прохождения*,

$$G=\frac{2ikk'}{(k'^2+k^2)\sin(k'a)+2ikk'\cos(k'a)}$$

$D(E)=|G|^2$ – вероятность прохождения электрона через барьер

$$D(E)=\frac{4E\left(E-|U_0|\right)}{4E\left(E-|U_0|\right)+|U_0|^2\sin^2\sqrt{2m_e\left(E-|U_0|\right)a^2/\hbar^2}},\quad E>|U_0|$$

$$2m_e\left(E-|U_0|\right)a^2/\hbar^2=\left(\frac{E}{|U_0|}-1\right)2m_e|U_0|\frac{a^2}{\hbar^2}$$

$$2m_e|U_0|\frac{a^2}{\hbar^2}=\bar{U}_0 - \text{БЕЗРАЗМЕРНАЯ ВЕЛИЧИНА}$$

$$1<\frac{E}{|U_0|}=x - \text{безразмерная величина}$$

$$D(x)=\frac{4x(x-1)}{4x(x-1)+\sin^2\sqrt{(x-1)\bar{U}_0}},\quad x>1$$

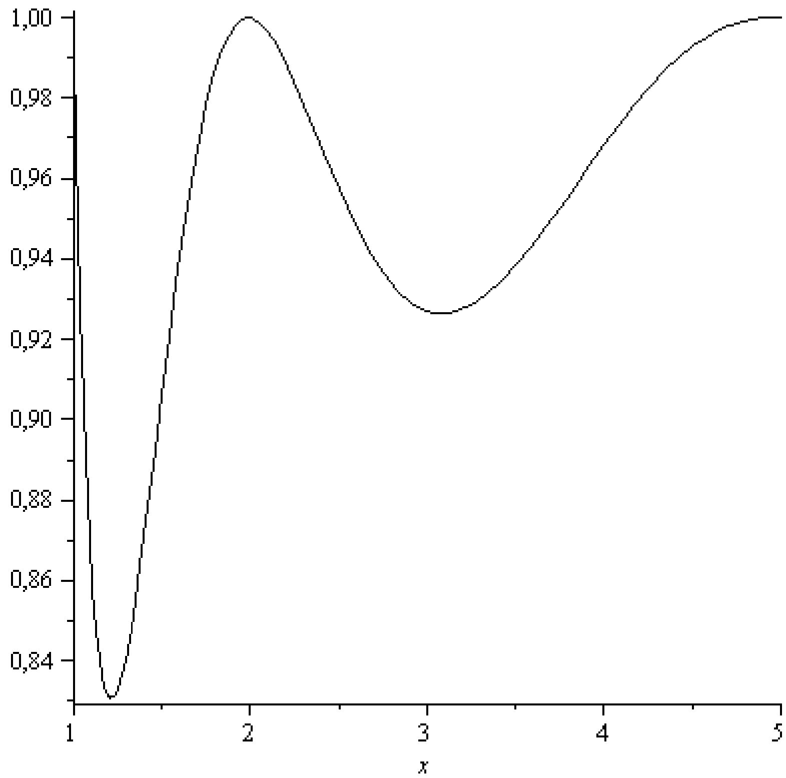

Рис. 1.

Зависимость вероятности прохождения $D(x)$ электрона через барьер от величины $x=\frac{E}{|U_0|}$ при $x>1$,

когда $\bar{U}_0=2m_e|U_0|\frac{a^2}{\hbar^2}=10$

.

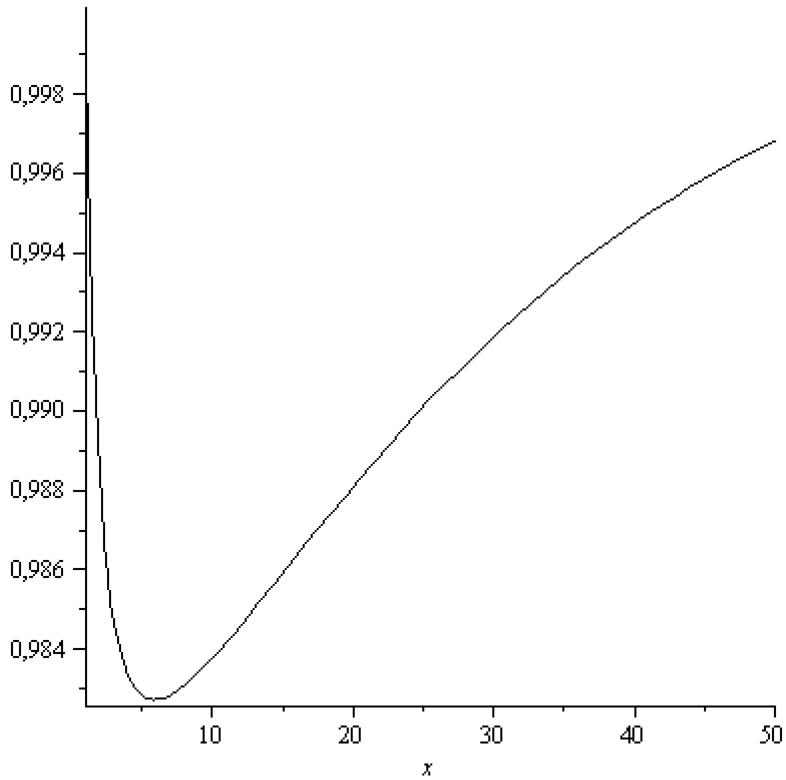

Рис. 2.

Зависимость вероятности прохождения $D(x)$ электрона через барьер от величины $x = \dfrac{E}{|U_0|}$ при $x > 1$,

когда $\bar{U}_0 = 2m_e|U_0|\dfrac{a^2}{\hbar^2} = 0.1$.

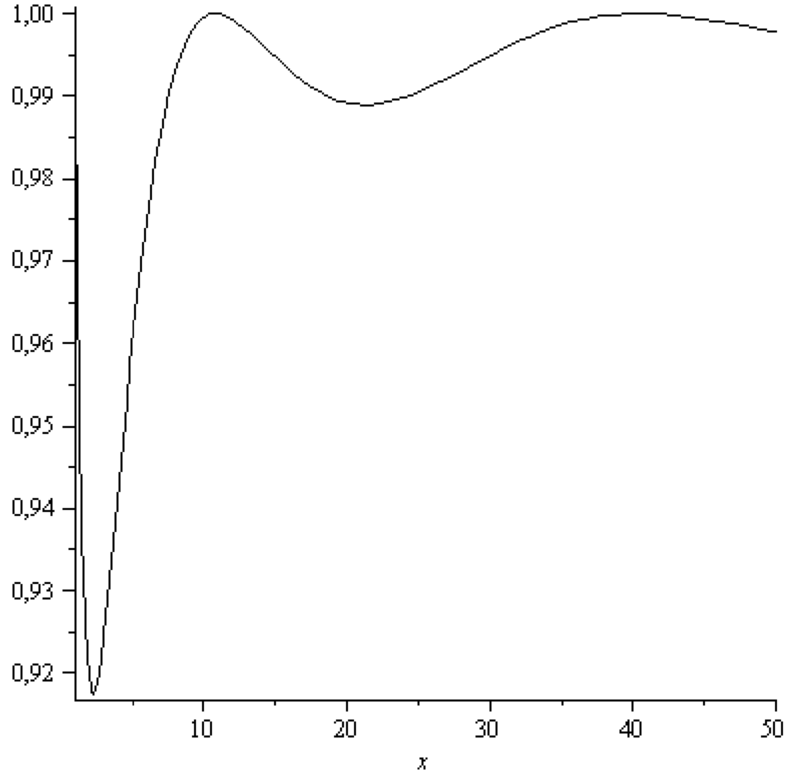

Рис. 3.

Зависимость вероятности прохождения $D(x)$ электрона через барьер от величины $x = \dfrac{E}{|U_0|}$ при $x > 1$,

когда $\bar{U}_0 = 2m_e |U_0| \dfrac{a^2}{\hbar^2} = 1$.

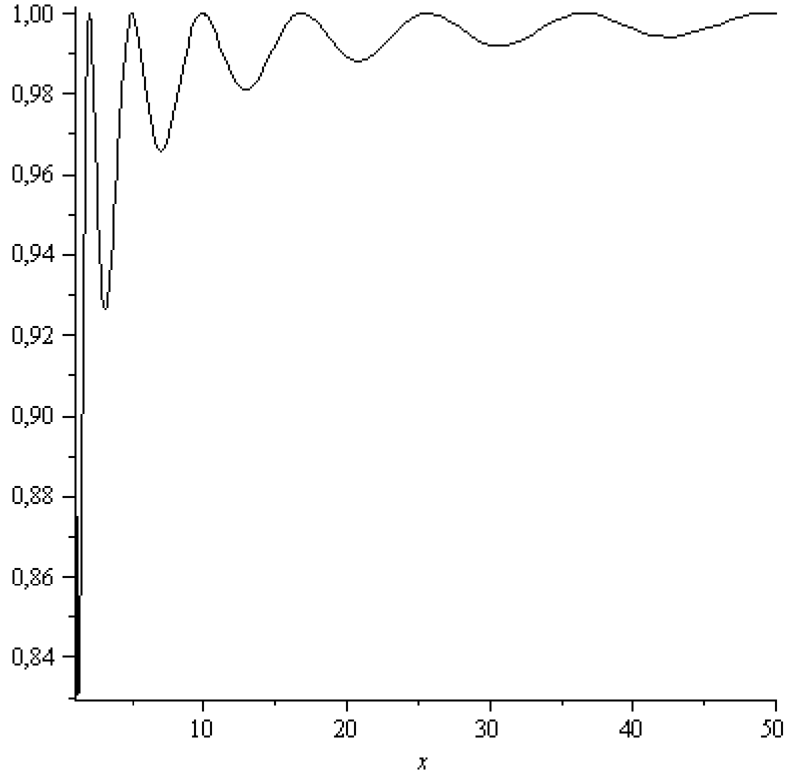

Рис. 4.

Зависимость вероятности прохождения $D(x)$ электрона через барьер от величины $x = \dfrac{E}{|U_0|}$ при $x > 1$,

когда $\bar{U}_0 = 2m_e |U_0| \dfrac{a^2}{\hbar^2} = 10$.

$$D(E)=\frac{4E\left(|U_0|-E\right)}{4E\left(|U_0|-E\right)+|U_0|^2\,sh^2\sqrt{2m_e\left(|U_0|-E\right)a^2/\hbar^2}},\quad 0<E<|U_0|$$

$$x=\frac{|U_0|}{E}$$

$$D(E)=\frac{4x(1-x)}{4x(1-x)+sh^2\sqrt{(1-x)\bar{U}_0}},\quad 0<x<1$$

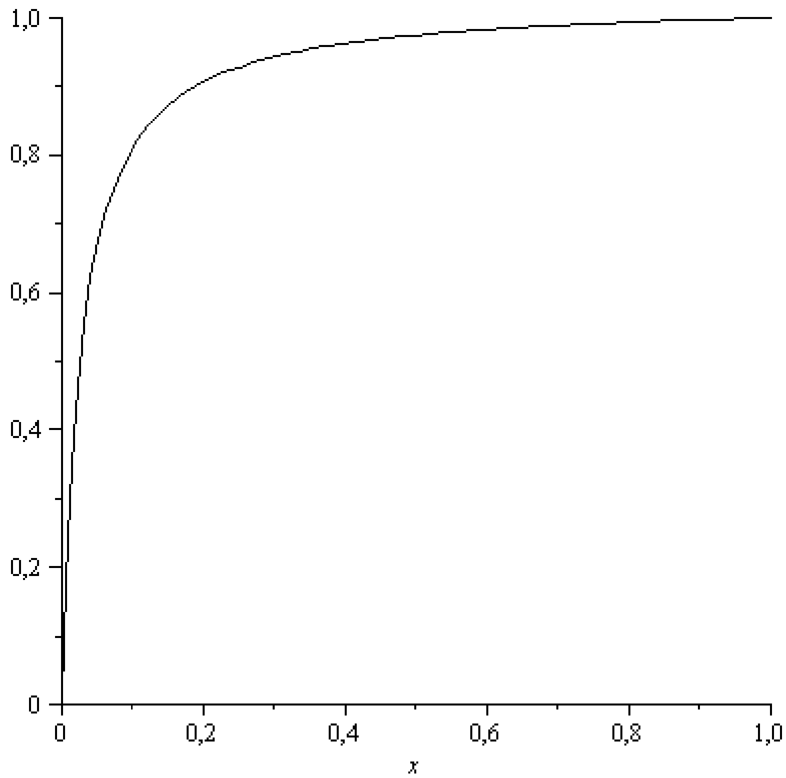

Рис. 5.

Зависимость вероятности прохождения $D(x)$ электрона через барьер от величины $x=\dfrac{E}{|U_0|}$ при $0<x<1$, когда $\bar{U}_0=2m_e|U_0|\dfrac{a^2}{\hbar^2}=0.1$.

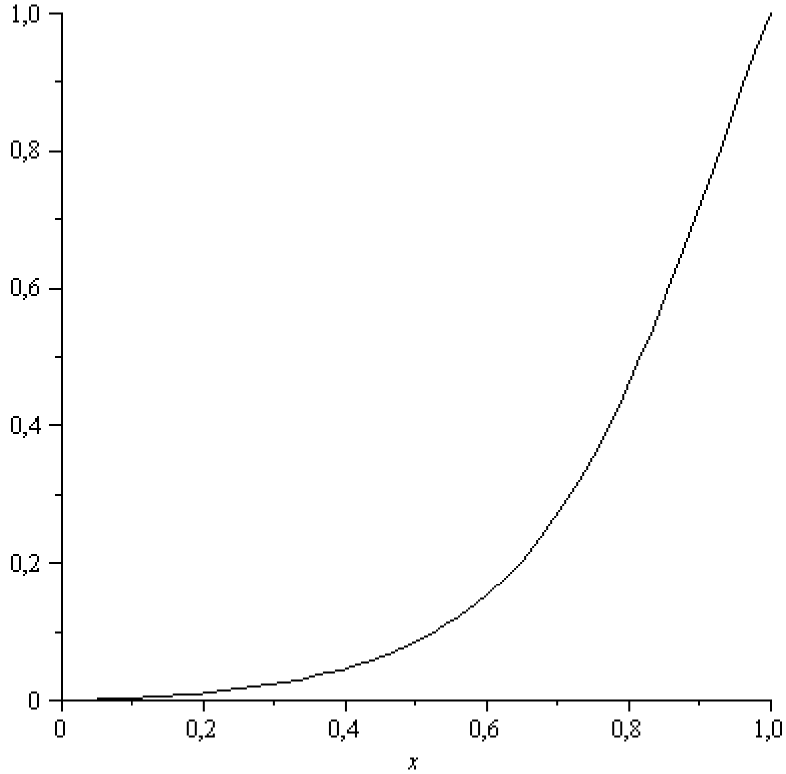

Рис. 6.

Зависимость вероятности прохождения $D(x)$ электрона через барьер от величины $x = \frac{E}{|U_0|}$ при $0 < x < 1$, когда $\bar{U}_0 = 2m_e |U_0| \frac{a^2}{\hbar^2} = 10$.

Рассеяние электрона на прямоугольной потенциальной яме

Стационарное уравнение Шредингера
(одномерное движение)

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

$\hat{H}$ – оператор Гамильтона,

$\psi(x)$ – волновая функция,

E – энергия электрона,

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

m_e – масса электрона,

$U(x)$ – потенциальная энергия электрона.

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \quad x > a \\ -|U_0|, & 0 < x < a \end{cases}$$

$$D(E) = \frac{4E\left(E + |U_0|\right)}{4E\left(E + |U_0|\right) + |U_0|^2 \sin^2 \sqrt{2m_e\left(E + |U_0|\right)a^2 / \hbar^2}}$$

$$\frac{E}{|U_0|} = x, \quad 0 < x$$

$$D(E) = \frac{4x(x+1)}{4x(x+1) + \sin^2 \sqrt{(x+1)\bar{U}_0}}$$

$$\bar{U}_0 = 2m_e|U_0|\frac{a^2}{\hbar^2}$$

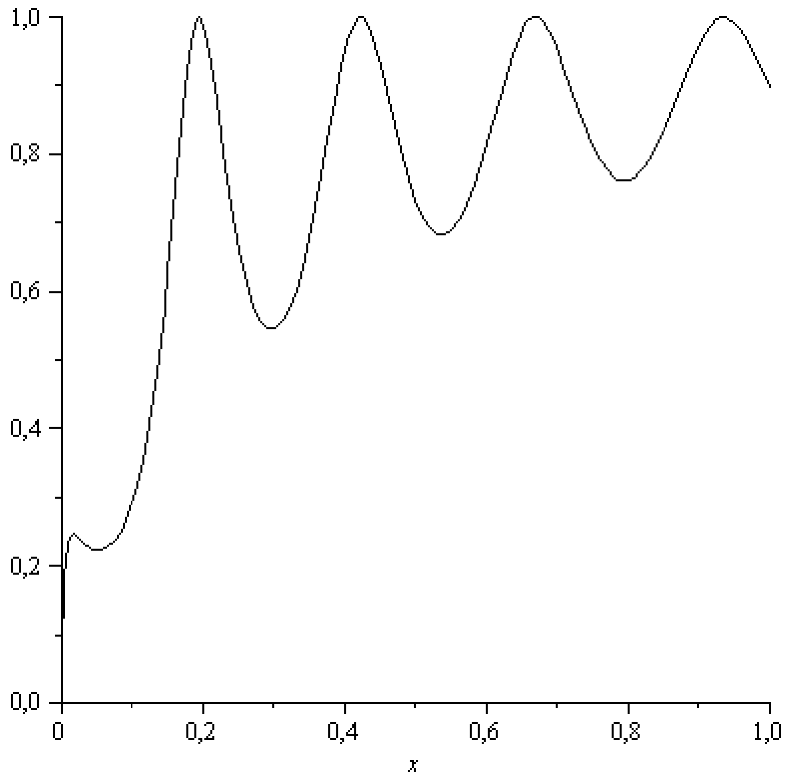

Рис. 6

7.

Зависимость вероятности прохождения $D(x)$ электрона через потенциальную яму от величины

$$x = \frac{E}{|U_0|} \text{ при } 0 < x \text{, когда } \bar{U}_0 = 2m_e |U_0| \frac{a^2}{\hbar^2} = 10000 .$$